前 言

“数值分析”是解决工科数学问题和工程实际问题的重要理论基础和实用工具，也是工科各专业博士研究生入学考试的内容。为了帮助广大学生更好地学习和掌握数值分析课程的理论精髓和解题方法，我们根据清华大学出版社出版的由李庆扬、王能超、易大义编写的《数值分析》教材的章节顺序，以其内容为基础编写了这本辅导教材。本书共分 9 章，每章均有重点、难点全析和习题全解两个板块。书末附了三套自测试题及答案，帮助学生自我检测学习效果。

(1)重点、难点全析：精练地列出了各章的主要知识点，理清了各知识点之间的脉络联系，列出了主要定理及其相关推论、重要公式等，帮助读者融会贯通，系统理解各章的体系结构，奠定扎实的理论基础。

(2)习题全解：对数值分析各章的习题作了详细解答，在解答过程中，对重点和难点习题进行了分析和讲解，归纳了解题技巧。

我们本着服务于读者学习、考试的角度，通过对习题的解答，揭示了数值分析的解题方法、规律和技巧，以帮助读者更好地理解该课程的基本概念和理论，开拓解题思路，提高数学素质。本书由杨刚、武燕，王宇翔编写，在编写过程中，得到了李强、黄蕊等同志的支持和帮助，在此表示衷心的感谢！对《数值分析》的作者李庆扬、王能超、易大义教授表示衷心的感谢！

由于编者水平有限，本书难免存在缺漏和不妥之处，请各位专家和广大读者批评指正。

编　者

2007 年 3 月

目　录

第1章　绪　论

1.1　重点、难点全析

1.1.1　误差来源及分类

数值分析主要研究两类误差.

1. 舍入误差

由于计算机字长有限,原始数据在计算机上的表示以及进行算术运算(+,−,×,÷)时可能产生的误差,称为舍入误差.

2. 截断误差(方法误差)

为了在有限步内得到运算结果,用有限的过程取代无穷的过程时产生的误差,称之为截断误差或方法误差.

用数值方法求解数学模型所得到的近似解包含舍入误差和截断误差两部分.

1.1.2　误差度量[①]

1. 绝对误差(误差)

(1) 定义:近似值 x^* 与准确值 x 之差称为绝对误差,简称误差.用公式表示为 $e(x^*) \xlongequal{\text{def}} x^* - x$. 在不引起混淆时可简记 $e(x^*)$ 为 e^*.

(2) 绝对误差限(误差限):绝对误差绝对值的一个上界,用符号表示为 $\varepsilon(x^*)$ 或 ε^*.

2. 相对误差

(1) 定义:绝对误差 e^* 与准确值 x(非零)的比值 $\frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x}$ 称为近似值

① 实际应用中,误差指绝对误差限,相对误差指相对误差限.

x^* 的相对误差,用符号表示为 $e_r(x^*)$ 或 e_r^*. 由于真值 x 总是未知的,故

$$e_r^* = \frac{e^*}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$$

当 x^* 较好地近似 x 时,两种方法仅相差高阶无穷小.

(2) 相对误差限:相对误差可正可负,它的绝对值的较小上界叫做相对误差限,记作 $\varepsilon_r(x^*)$ 或 ε_r^*,即用

$$\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{|x^*|}$$

计算.

3. 有效数字

(1) 定义:设准确值 x 的近似值 x^*(非零)可表示为

$$x^* = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}) \tag{1.1}$$

式(1.1)中 $a_i (i = 1, \cdots, n)$ 是 0 ~ 9 中的一个数字,$a_1 \neq 0$,m 为整数,且使

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n^*+1}$$

成立的整数 n^* 的最大值为 n,则称 x^* 近似 x 具有 n 位有效数字;a_1, a_2, $\cdots$, a_n 分别是 x^* 近似 x 的第 1 位、第 2 位、……、第 n 位有效数字.

(2) 有效数:称近似值末位也是有效数字的近似数为有效数. 此时,绝对误差限不超过末位单位的一半. 进而可以知道,对准确值进行四舍五入或对近似数的准确位进行四舍五入所得近似值均为有效数. 有效数的有效数字位数等于左起第一位非零数字到末位数字的位数.

4. 三种度量间的联系

(1) 绝对误差与相对误差的关系参阅相对误差的定义.

(2) 绝对误差与有效数字的关系参阅有效数字的定义.

(3) 相对误差与有效数字的关系参阅教材.

定理 1.1 设非零近似数 x^* 有形如式(1.1)的表示,若 x^* 具有 n 位有效数字,则相对误差限为

$$\varepsilon_r^* \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}$$

定理 1.2 设非零近似数 x^* 有形如式(1.1)的表示,若 x^* 的相对误差限为

$$\varepsilon_r^* \leqslant \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{1-n}$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字.

1.1.3 初值误差传播

1. 一元函数误差传播

$$e(f(x^*)) = f(x^*) - f(x) \approx f'(x^*)e(x^*)$$

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)|\varepsilon(x^*)$$

$$\varepsilon_r(f(x^*)) \approx C_p(f, x^*)\varepsilon_r(x^*)$$

其中条件数

$$C_p(f, x^*) \xlongequal{\text{def}} \left|\frac{x^* f'(x^*)}{f(x^*)}\right|$$

2. n 元函数误差传播

$$e(f(x_1^*, \cdots, x_n^*)) = f(x_1^*, \cdots, x_n^*) - f(x_1, \cdots, x_n) \approx \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\bigg|_{(x_1^*, \cdots, x_n^*)}\right)e(x_k^*)$$

$$\varepsilon(f(x_1^*, \cdots, x_n^*)) \approx \sum_{k=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_k}\bigg|_{(x_1^*, \cdots, x_n^*)}\right|\varepsilon(x_k^*)$$

$$\varepsilon_r(f(x_1^*, \cdots, x_n^*)) \approx \sum_{k=1}^{n}C_p(f, x_k^*)\varepsilon_r(x_k^*)$$

$$C_p(f, x_k^*) \xlongequal{\text{def}} \left|\frac{x_k^* \dfrac{\partial f}{\partial x_k}\bigg|_{(x_1^*, \cdots, x_n^*)}}{f(x_1^*, \cdots, x_n^*)}\right|$$

3. 二元算术运算的误差传播

$$\varepsilon(x_1^* \pm x_2^*) = \varepsilon(x_1^*) + \varepsilon(x_2^*)$$

$$\varepsilon(x_1^* x_2^*) \approx |x_2^*|\varepsilon(x_1^*) + |x_1^*|\varepsilon(x_2^*)$$

$$\varepsilon\left(\frac{x_1^*}{x_2^*}\right) \approx \frac{|x_2^*|\varepsilon(x_1^*) + |x_1^*|\varepsilon(x_2^*)}{|x_2^*|^2}, \quad x_2^* \neq 0$$

$$\varepsilon_r(x_1^* + x_2^*) \approx \max\{\varepsilon_r(x_1^*), \varepsilon_r(x_2^*)\}, \quad x_1^* x_2^* > 0$$

$$\varepsilon_r(x_1^* \mathop{\div}\limits^{\times} x_2^*) \approx \varepsilon_r(x_1^*) + \varepsilon_r(x_2^*), \quad x_1^* x_2^* \neq 0$$

1.1.4 算法的数值稳定性

一个算法如果输入数据有误差,而在计算过程中舍入误差不增长,则称此算法是数值稳定的,否则称此算法为数值不稳定的.

1.1.5 算法设计中避免误差危害的若干原则

(1) 要避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法.

(2) 要避免两相近数相减.

(3) 要防止大数"吃掉"小数.

(4) 注意简化计算步骤,减少运算次数.

1.2 习题全解

1. 设 $x>0$, x 的相对误差为 δ,求 $\ln x$ 的误差.

解 $\ln x^* - \ln x \approx \dfrac{1}{x^*}(x^*-x)$,相对误差

$$|e(\ln x^*)| \approx |e_r(x^*)| \leqslant \delta$$

进而有
$$\varepsilon(\ln(x^*)) \approx \delta$$

2. 设 x 的相对误差为 2%,求 x^n 的相对误差.

解 函数值的条件数为

$$C_p(x^n, x^*) = \left|\frac{x^* n(x^*)^{n-1}}{(x^*)^n}\right| = n$$

根据函数值误差传播公式

$$\varepsilon_r((x^*)^n) \approx C_p(x^n, x^*)\varepsilon_r(x^*) = n\times 2\% = 0.02n$$

3. 下列各数都是经过四舍五入得到的近似数,即误差限不超过最后一位的半个单位,试指出它们有几位有效数字.

$x_1^* = 1.1021$, $x_2^* = 0.031$, $x_3^* = 385.6$, $x_4^* = 56.430$, $x_5^* = 7\times 1.0$

解 因为近似数的误差限不超过最后一位的半个单位,所以这些数均为有效数. 而有效数的有效数字位数为第一位非零数到最后一位数字的位数,所以

x_1^* 有 5 位有效数字, x_2^* 有 2 位有效数字, x_3^* 有 4 位有效数字, x_4^* 有 5 位有效数字, x_5^* 有 2 位有效数字

4. 利用公式(2.3)(误差传播公式)计算下列各近似值的误差限:

(i) $x_1^* + x_2^* + x_4^*$ (ii) $x_1^* x_2^* x_3^*$ (iii) $\dfrac{x_2^*}{x_4^*}$

其中 x_1^*, x_2^*, x_3^*, x_4^* 均为第 3 题所给的数.

解 $\varepsilon(x_1^*) = 0.5\times 10^{-4}$, $\varepsilon(x_2^*) = 0.5\times 10^{-3}$, $\varepsilon(x_3^*) = 0.5\times 10^{-1}$,

$\varepsilon(x_4^*)=0.5\times10^{-3}, \varepsilon(x_5^*)=0.5\times10^{-1}$

(ⅰ) $\varepsilon(x_1^*+x_2^*+x_4^*)=\varepsilon(x_1^*)+\varepsilon(x_2^*)+\varepsilon(x_4^*)=$
$0.5\times10^{-4}+0.5\times10^{-3}+0.5\times10^{-3}=$
1.05×10^{-3}

(ⅱ) $\varepsilon(x_1^*x_2^*x_3^*)\approx|x_2^*x_3^*|\varepsilon(x_1^*)+|x_1^*x_3^*|\varepsilon(x_2^*)+|x_1^*x_2^*|\varepsilon(x_3^*)=$
$0.031\times385.6\times0.5\times10^{-4}+$
$1.1021\times385.6\times0.5\times10^{-3}+$
$1.1021\times0.031\times0.5\times10^{-1}=0.21479$

(ⅲ) $\varepsilon\left(\frac{x_2^*}{x_4^*}\right)=\frac{|x_4^*|\varepsilon(x_2^*)+|x_2^*|\varepsilon(x_4^*)}{(x_4^*)^2}=$

$\frac{56.430\times0.5\times10^{-3}+0.031\times0.5\times10^{-3}}{56.430^2}\approx$

0.88654×10^{-5}

5. 计算球体积要使相对误差限为1%，问度量半径R时允许的相对误差限是多少?

解 计算球体积$V=\frac{4}{3}\pi R^3$近似值的条件数为

$$C_p(V^*)=\left|\frac{R^*V'(R^*)}{V(R^*)}\right|=\frac{R^*4\pi(R^*)^2}{\frac{4}{3}\pi(R^*)^3}=3$$

应用误差传播公式有

$$\varepsilon_r(V^*)\approx C_p(V^*)\varepsilon_r(R^*)=3\varepsilon_r(R^*)$$

令$3\varepsilon_r(R^*)=1\%$，可得度量半径R时允许的相对误差限为

$$\varepsilon_r(R^*)=\frac{1}{3}\times1\%\approx0.0033$$

6. 设$Y_0=28$，按递推公式

$$Y_n=Y_{n-1}-\frac{1}{100}\sqrt{783},\quad n=1,2,\cdots$$

计算到Y_{100}。若取$\sqrt{783}\approx27.982$(5位有效数字)，试问计算Y_{100}将有多大误差?

解 $Y_n=Y_{n-1}-\frac{1}{100}\sqrt{783}=\left(Y_{n-2}-\frac{1}{100}\sqrt{783}\right)-\frac{1}{100}\sqrt{783}=$

$$Y_{n-2}-\frac{2}{100}\sqrt{783}=\left(Y_{n-3}-\frac{1}{100}\sqrt{783}\right)-\frac{2}{100}\sqrt{783}=$$

$$Y_{n-3}-\frac{3}{100}\sqrt{783}=\cdots=Y_0-\frac{n}{100}\sqrt{783}$$

故有 $Y_{100}=Y_0-\frac{100}{100}\sqrt{783}$，即 $Y_{100}=Y_0-\sqrt{783}$， $Y_{100}^*=Y_0-27.982$

$$|e(Y_{100}^*)|=|Y_{100}^*-Y_{100}|=|\sqrt{783}-27.982|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}=\varepsilon(Y_{100}^*)$$

7. 求方程 $x^2-56x+1=0$ 的两个根，使它至少具有4位有效数字（$\sqrt{783}\approx 27.982$）.

解 根据求根公式可知方程的根为

$$x_{1,2}=28\pm\sqrt{783}$$

故

$$x_1=28+\sqrt{783}\approx 28+27.982=55.982$$

$$x_2=28-\sqrt{783}=\frac{1}{28+\sqrt{783}}\approx\frac{1}{55.982}\approx 0.017\,863$$

故根据误差传播公式可知两根近似值均满足题设要求.

8. 当 N 充分大时，怎样求 $\int_N^{N+1}\frac{1}{1+x^2}dx$？

解 $$\int_N^{N+1}\frac{1}{1+x^2}dx=\arctan(N+1)-\arctan(N)\xlongequal{\text{def}}\alpha-\beta=$$

$$\arctan(\tan(\alpha-\beta))=\arctan\frac{\tan\alpha-\tan\beta}{1+\tan\alpha\tan\beta}=$$

$$\arctan\frac{N+1-N}{1+(N+1)N}=\arctan\frac{1}{1+N+N^2}$$

9. 正方形的边长大约为 100 cm，应怎样测量才能使其面积误差不超过 1 cm^2？

解 设正方形边长为 a，面积为 M，于是有

$$M=a^2,\quad M^*=(a^*)^2,\quad \varepsilon(M^*)=1,\quad a^*=100$$

应用误差传播公式有

$$\varepsilon(M^*)\approx 2a^*\varepsilon(a^*)=200\varepsilon(a^*)$$

令
$$200\varepsilon(a^*)\leqslant 1$$

得
$$\varepsilon(a^*)\leqslant 0.5\times10^{-2}$$

故正方形边长误差限应不超过 0.005 cm，才能使其面积误差不超过 1 cm^2.

10. 设 $S=\frac{1}{2}gt^2$，假定 g 是准确的，而对 t 的测量有 ±0.1 s 的误差，证明当 t 增加时，S 的绝对误差增加，而相对误差却减少.

证明 由题意知 $\varepsilon(t^*)=0.1$, $S^*=\frac{1}{2}g(t^*)^2$

绝对误差限

$$\varepsilon(S^*)\approx|gt^*|\varepsilon(t^*)=0.1gt^*$$

相对误差限

$$\varepsilon_r(S^*)=\frac{\varepsilon(S^*)}{S^*}\approx\frac{0.1gt^*}{\frac{1}{2}g(t^*)^2}=\frac{0.2}{t^*}$$

由于 t 增加时，其近似值 t^* 也增加，故可知题目结论正确.

11. 序列 $\{y_n\}$ 满足递推关系

$$y_n=10y_{n-1}-1,\quad n=1,2,\cdots$$

若 $y_0=\sqrt{2}\approx1.41$（三位有效数字），计算到 y_{10} 时误差有多大？这个计算过程稳定吗？

解 $y_n=10y_{n-1}-1=10(10y_{n-2}-1)-1=10^2y_{n-2}-[1+10^1]=$
$10^2(10y_{n-3}-1)-[1+10^1]=10^3y_{n-3}-[1+10^1+10^2]=$
$\cdots$
$=10^ny_0-\sum_{i=0}^{n-1}10^i=10^ny_0-\frac{1}{9}(10^n-1)=$
$10^n\left(\sqrt{2}-\frac{1}{9}\right)+\frac{1}{9}$

故

$$y_{10}=10^{10}\left(\sqrt{2}-\frac{1}{9}\right)+\frac{1}{9},\quad y_{10}^*=10^{10}\left(1.41-\frac{1}{9}\right)+\frac{1}{9}$$

绝对误差

$$|e(y_{10}^*)|=|y_{10}^*-y_{10}|=10^{10}(\sqrt{2}-1.41)\leqslant$$
$$10^{10}\times\frac{1}{2}\times10^{-2}=\frac{1}{2}\times10^8$$

计算到 y_{10} 时误差为 $\frac{1}{2}\times10^8$，故在绝对误差的意义下该方法不稳定.

12. 计算 $f=(\sqrt{2}-1)^6$，取 $\sqrt{2}\approx1.4$，利用下列等式计算，哪一个得到的结果最好？

$$\frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6},\quad (3-2\sqrt{2})^3,\quad \frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3},\quad 99-70\sqrt{2}$$

解 $99-7\sqrt{2}$ 出现相近数相减，$(3-2\sqrt{2})^3$ 出现较相近的数相减，故二者不

可能得到最好的结果．$\frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6}$与$\frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3}$均不出现相近数相减，但前者的乘法运算次数多，而除法运算次数相同，每次乘除法运算必然引入新的舍人误差，故用式$\frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3}$计算将得到最好的运算结果．

13. $f(x)=\ln(x-\sqrt{x^3-1})$，求$f(30)$的值．若开平方用6位函数表，问求对数时误差有多大？若改用另一等价公式

$$\ln(x-\sqrt{x^2-1})=-\ln(x+\sqrt{x^2-1})$$

计算，求对数时误差有多大？

解 $f(30)=\ln(30-\sqrt{899})$，设$u=\sqrt{899}$，$y=f(30)$，则$u^*=29.9833$，所以$\varepsilon(u^*)=\frac{1}{2}\times10^{-4}$，故

$$\varepsilon(y^*)\approx\frac{1}{|30-u^*|}\varepsilon(u^*)=\frac{1}{0.0167}\varepsilon(u^*)\approx0.003$$

改用等价公式 $\ln(x^2-\sqrt{x^2}-1)=-\ln(x+\sqrt{x^2}-1)$

则 $$f(30)=-\ln(30+\sqrt{899})$$

故 $$\varepsilon(y^*)=\left|-\frac{1}{30+u^*}\right|\varepsilon(u^*)=$$

$$\frac{1}{59.9833}\varepsilon(u^*)\approx0.834\times10^{-6}$$

第2章　插值法

1.1　重点、难点全析

1.1.1　插值问题

1. 定义

设函数 $y=f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上有定义，且已知在点 $a\leqslant x_0\leqslant x_1<\cdots<x_n\leqslant b$ 上的值 $y_0,y_1,\cdots,y_n$，若存在一简单函数 $P(x)$，使得

$$P(x_i)=y_i, i=0,1,\cdots,n \tag{2.1}$$

成立，则称 $P(x)$ 是 $f(x)$ 关于节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的一个插值函数.

点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 称为插值节点；$[a,b]$ 称为插值区间；$f(x)$ 为被插值函数；式(2.1)即为插值条件.

用 $P(\bar{x})$ 的值作为 $f(\bar{x})$ 的近似值，当 $\bar{x}$ 在节点形成的区间上时，称该方法为内插法；当 $\bar{x}$ 不在节点形成的区间上但在插值区间上时，则称该方法为外插法.

当插值函数 $P(x)$ 为多项式时，称 $P(x)$ 是 $f(x)$ 的一个插值多项式，相应的插值法称为多项式插值.

插值余项 $R(x)\xlongequal{\text{def}}f(x)-P(x)$，插值余项又称为截断误差.

2. 插值多项式的存在唯一性定理

定理2.1　满足插值条件(2.1)的不超过 n 次的插值多项式 $P(x)$ 是存在唯一的.

推论2.2　若 $f(x)$ 是不超过 n 次的多项式，则它的关于 $n+1$ 个互异节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的不超过 n 次的插值多项式 $P(x)$ 与被插值函数 $f(x)$ 恒等，即 $P(x)\equiv f(x)$.

3. 误差估计

(1) 导数型误差估计定理：

定理 2.3 设 $f(x) \in C^{(n)}[a, b]$，$f^{(n+1)}(x)$ 在 (a, b) 内存在．插值余项

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)$$

式中 $P_n(x)$ 是 $f(x)$ 关于互异节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 的插值多项式，$w_{n+1}(x) \xlongequal{\text{def}} (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$，$\xi \in (a, b)$ 且依赖于 x 和插值节点．

(2) 均差(也称差商)型误差估计定理：

定理 2.4 设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有定义，$P_n(x)$ 同定理 2.3 中的说明，则有插值余项

$$R_n(x) = f[x, x_0, x_1, \cdots, x_n] w_{n+1}(x)$$

(3) 等距节点的插值误差估计：当节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 等距分布时，即有 $x_k = x_0 + kh (h > 0, k = 0, 1, \cdots, n)$，作变换 $x = x_0 + th$，则导数型误差估计简化为

$$R_n(x_0 + th) = f(x_0 + th) - P_n(x_0 + th) = \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_n)$$

如果作变换 $x = x_n + th$，则误差估计简化为

$$R_n(x_n + th) = f(x_n + th) - P_n(x_n + th) = \frac{t(t+1)\cdots(t+n)}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_n)$$

1.1.2 插值多项式的构造方法

1. 依据插值条件建立线性方程组

设不超过 n 次的插值多项式 $P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$，其系数是如下线性方程组的解：

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

2. Lagrange 插值方法

$$P_n(x) = f(x_0)l_0(x) + f(x_1)l_1(x) + \cdots + f(x_n)l_n(x) \xlongequal{\text{def}} L_n(x) \qquad (2.2)$$

式中$\{l_k(x)\}_{k=0}^{n}$是关于节点$x_0,x_1,\cdots,x_n$的Lagrange插值基函数，它仅与节点有关，与被插值函数无关．具体定义为

$$l_k(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}=$$

$$\frac{w_{n+1}(x)}{(x-x_k)w'_{n+1}(x_k)}\quad(k=0,1,2,\cdots,n)$$

插值公式(2.2)称为Lagrange插值多项式．

3. Newton插值方法

$$P_n(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+\cdots+$$
$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})\xlongequal{\text{def}}N_n(x)\quad(2.3)$$

式中$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]$为k阶差商，插值公式(2.3)称为Newton插值公式．

4. 等距节点插值公式

基于变换$x=x_0+th(h>0)$的插值公式(Newton向前插值公式)

$$N_n(x_0+th)=f_0+t\Delta f_0+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0+\cdots+$$
$$\frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0\quad(2.4)$$

式中$\Delta^k f_0(k=1,2,\cdots,n)$为$k$阶向前差分．

基于变换$x=x_n+th(h>0)$的插值公式(Newton向后插值公式)

$$N_n(x_n+th)=f_n+t\nabla f_n+\frac{t(t+1)}{2!}\nabla^2 f_n+\cdots+$$
$$\frac{t(t+1)\cdots(t+n-1)}{n!}\nabla^n f_n\quad(2.5)$$

式中$\nabla^k f_n(k=1,2,\cdots,n)$为$k$阶向后差分．

1.1.3　基函数、差商和差分的性质

1. Lagrange插值基函数

(1) $l_j(x_k)=\begin{cases}1, & k=j\\0, & k\neq j\end{cases}\quad(j,k=0,1,\cdots,n)$

(2) $l_0(x)+l_1(x)+\cdots+l_n(x)\equiv 1$

(3) $x_0^k l_0(x)+x_1^k l_1(x)+\cdots+x_n^k l_n(x)\equiv x^k\quad(k=0,1,\cdots,n)$

2. 均差

(1) 差商的函数值表示：

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \sum_{j=0}^{k} \frac{f(x_j)}{(x_j - x_0)\cdots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\cdots(x_j - x_k)} = \sum_{j=0}^{k} \frac{f(x_j)}{w'_{k+1}(x_j)}$$

式中 $w_{k+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_k)$.

(2) 对称性:差商与节点的排列次序无关.

(3) 线性组合性质:

$$(c_1 f + c_2 g)[x_0, x_1, \cdots, x_k] = c_1 f[x_0, x_1, \cdots, x_k] + c_2 g[x_0, x_1, \cdots, x_k]$$

式中 c_1 及 c_2 为常数.

(4) 与导数的关系:

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}, \quad \xi \in [a,b]$$

3. 差分(等距节点)

(1) $\Delta^n f_k = (E - I)^n f_k = \sum_{j=0}^{n} (-1)^j \binom{n}{j} f_{n+k-j}$

$\nabla^n f_k = (I - E^{-1})^n f_k = \sum_{j=0}^{n} (-1)^{n-j} \binom{n}{j} f_{k+j-n}$

(2) $f_{n+k} = (I + \Delta)^n f_k = [\sum_{j=0}^{n} \binom{n}{j} \Delta^j] f_k$

(3) $f[x_k, x_{k+1}, \cdots, x_{k+m}] = \frac{1}{m!} \frac{1}{h^m} \Delta^m f_k \quad (m = 1,2,\cdots,n)$

$f[x_k, x_{k-1}, \cdots, x_{k-m}] = \frac{1}{m!} \frac{1}{h^m} \nabla^m f_k$

(4) $\Delta^n f_k = h^n f^{(n)}(\xi), \ x_k < \xi < x_{k+n}$

1.1.4 Hermite 插值

1. 插值条件

$$H(x_j) = f(x_j), \ H'(x_j) = f'(x_j) \quad (j = 0, 1, \cdots, n) \tag{2.6}$$

2. 存在唯一性

满足插值条件式(2.6)的不超过 $2n+1$ 次的插值多项式是存在唯一的.

3. 基函数表示形式

$$H_{2n+1}(x)=\sum_{j=0}^{n}[f(x_j)\alpha_j(x)+f'(x_j)\beta_j(x)] \tag{2.7}$$

式中　$\alpha_j(x)=\left(1-2(x-x_j)\sum_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n}\frac{1}{x_j-x_k}\right)l_j^2(x)$，　$\beta_j(x)=(x-x_j)l_j^2(x)$

4. 误差估计

定理 2.5　设 $f(x)\in \mathbf{C}^{2n+1}[a,b]$，$f^{(2n+2)}(x)$ 在 (a,b) 内存在，则有误差估计

$$R_{2n+1}(x)=f(x)-H_{2n+1}(x)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}w^2(x),\quad \xi\in(a,b)$$

式中 ξ 依赖于 x 及插值节点.

1.1.5　分段插值

1. 分段线性插值

(1) 插值形式：函数 $f(x)$ 关于节点 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 的分段线性插值函数

$$I_h(x)=\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}f(x_k)+\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}f(x_{k+1})$$

$$x_k\leqslant x\leqslant x_{k+1},\quad k=0,1,\cdots,n-1$$

(2) 误差估计：

$$\max_{a\leqslant x\leqslant b}|f(x)-I_h(x)|\leqslant\frac{M_2}{8}h^2$$

式中　$M_2\xlongequal{\text{def}}\max_{a\leqslant x\leqslant b}|f''(x)|$，　$h_k\xlongequal{\text{def}}x_{k+1}-x_k$，　$h\xlongequal{\text{def}}\max_{0\leqslant k\leqslant n-1}h_k$

(3) 收敛性：当 $f(x)\in\mathbf{C}[a,b]$ 时有 $\lim_{h\to 0}I_h(x)=f(x)$ 在 $[a,b]$ 上一致成立.

2. 分段三次 Hermite 插值

(1) 插值形式：函数 $f(x)$ 关于节点 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 的分段三次 Hermite 插值函数

$$I_h(x)=\left(1+2\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2f(x_k)+$$

$$\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2(x-x_k)f'(x_k)+$$

$$\left(1+2\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)\left(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)^2f(x_{k+1})+$$

$$\left(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)^2(x-x_{k+1})f'(x_{k+1})$$

$$x\in[x_k,x_{k+1}],(k=0,1,2,\cdots,n-1)$$

(2) 误差估计：当 $f(x)\in C^4[a,b]$ 且有 $M_4\xlongequal{\text{def}}\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f^{(4)}(x)|$，则

$$|R(x)|=|f(x)-I_h(x)|\leqslant\frac{h^4}{384}M_4$$

式中 $h\xlongequal{\text{def}}\max\limits_{0\leqslant i\leqslant n-1}h_i$，$h_i\xlongequal{\text{def}}x_{i+1}-x_i$.

当 $f(x)\in C^1[a,b]$ 且 $M_1\xlongequal{\text{def}}\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f'(x)|$ 时，则

$$\max_{a\leqslant x\leqslant b}|f(x)-I_h(x)|\leqslant\frac{35}{27}hM_1$$

(3) 收敛性：当 $f(x)\in C^1[a,b]$ 时，则 $\lim\limits_{h\to 0}I_h(x)=f(x)$ 在 $[a,b]$ 上一致成立.

3. 三次样条插值

(1) 定义：若函数 $S(x)\in C^2[a,b]$，且在每个小区间 $[x_j,x_{j+1}]$ $(j=0,1,\cdots,n-1)$ 上是三次多项式，则称 $S(x)$ 是关于节点 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 的三次样条函数. 若进一步有

$$S(x_j)=f(x_j)\quad(j=0,1,\cdots,n)$$

则称 $S(x)$ 为三次样条插值函数.

(2) 存在唯一性：满足下列三组附加条件之一的三次样条插值函数是唯一存在的.

第一组(转角条件)：$S'(x_0)=f'(x_0)$，$S'(x_n)=f'(x_n)$；

第二组(弯矩条件)：$S''(x_0)=f''(x_0)$，$S''(x_n)=f''(x_n)$；

第三组(周期条件)：$S^{(i)}(x_0+0)=S^{(i)}(x_n-0)$，$i=0,1,2$.

(3) 插值形式：

$$S(x)=M_j\frac{(x_{j+1}-x)^3}{6h_j}+M_{j+1}\frac{(x-x_j)^3}{6h_j}+\left(f(x_j)-\frac{M_jh_j^2}{6}\right)\frac{x_{j+1}-x}{h_j}+$$

$$\left(f(x_{j+1})-\frac{M_{j+1}h_j^2}{6}\right)\frac{x-x_j}{h_j},x\in[x_j,x_{j+1}],\quad j=0,1,\cdots,n-1$$

式中 $h_j=x_{j+1}-x_j$.

对于第一组边界条件，参数 $\{M_j\}_{j=0}^n$ 是下列方程组的解：

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & & \\ & \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix} = 6 \begin{bmatrix} f[x_0, x_0, x_1] \\ f[x_0, x_1, x_2] \\ f[x_1, x_2, x_3] \\ \vdots \\ f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] \\ f[x_{n-1}, x_n, x_n] \end{bmatrix}$$

式中 $\mu_j = \dfrac{h_{j-1}}{h_{j-1} + h_j}, \quad \lambda_j = \dfrac{h_j}{h_{j-1} + h_j} \quad (j = 1, 2, \cdots, n-1)$

$$f[x_0, x_0, x_1] \xlongequal{\text{def}} \frac{f'(x_0) - f[x_0, x_1]}{x_0 - x_1} = \frac{f[x_0, x_1] - f'(x_0)}{h_0}$$

$$f[x_{n-1}, x_n, x_n] \xlongequal{\text{def}} \frac{f[x_{n-1}, x_n] - f'(x_n)}{x_{n-1} - x_n} = \frac{f'(x_n) - f[x_{n-1}, x_n]}{h_{n-1}}$$

这样方程组右端的差商部分可用带重节点的差商表计算，则有

$$\begin{array}{llll}
x_0 & f(x_0) & & \\
 & & f'(x_0) & \\
x_0 & f(x_0) & & f[x_0, x_0, x_1] \\
 & & f[x_0, x_1] & \\
x_1 & f(x_1) & & f[x_0, x_1, x_2] \\
 & & f[x_1, x_2] & \\
x_2 & f(x_2) & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
x_{n-1} & f(x_{n-1}) & & \\
 & & f[x_{n-1}, x_n] & \\
x_n & f(x_n) & & f[x_{n-1}, x_n, x_n] \\
 & & f'(x_n) & \\
x_n & f(x_n) & &
\end{array}$$

对于第二组边界条件，$\{M_k\}_{k=1}^{n-1}$ 是下列方程组的解

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 & & & & \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & & \\ & \mu_3 & 2 & \lambda_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ & & & & \mu_{n-1} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6f[x_0, x_1, x_2] - \mu_1 M_0 \\ 6f[x_1, x_2, x_3] \\ 6f[x_2, x_3, x_4] \\ \vdots \\ 6f[x_{n-3}, x_{n-2}, x_{n-1}] \\ 6f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] - \lambda_{n-1} M_n \end{bmatrix}$$

$$M_0 = f''(x_0), M_n = f''(x_n)$$

对于第三组边界条件，$\{M_k\}_{k=0}^{n}$ 是下列方程组的解（$M_n = M_0$）

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 & & & & \mu_1 \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & & \\ & \mu_3 & 2 & \lambda_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ \lambda_n & & & & \mu_n & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix} = 6 \begin{bmatrix} f[x_0, x_1, x_2] \\ f[x_1, x_2, x_3] \\ f[x_2, x_3, x_4] \\ \vdots \\ f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] \\ \dfrac{f[x_0, x_1] - f[x_{n-1}, x_n]}{h_0 + h_{n-1}} \end{bmatrix}$$

式中 $\lambda_n = \dfrac{h_0}{h_{n-1} + h_0}$，$\mu_n = \dfrac{h_{n-1}}{h_{n-1} + h_0}$.

(4) 误差估计及收敛性：

定理 2.6 设 $f(x) \in C^4[a, b]$，$S(x)$ 是 $f(x)$ 关于节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 的三次样条插值函数，附加第一组或第二组边界条件．则有误差估计

$$\max_{a \leqslant x \leqslant b} |f^{(m)}(x) - S^{(m)}(x)| \leqslant C_m \max_{a \leqslant x \leqslant b} |f^{(4)}(x)| h^{4-m} \quad (m = 0, 1, 2)$$

式中 $C_0 = \dfrac{5}{384}$，$C_1 = \dfrac{1}{24}$，$C_2 = \dfrac{3}{8}$，$h = \max\limits_{0 \leqslant k \leqslant n-1} h_k$，$h_k = x_{k+1} - x_k$.

从上述定理自然得到，当 $h \to 0$ 时，$S(x)$，$S'(x)$ 和 $S''(x)$ 均分别一致收敛到 $f(x)$，$f'(x)$ 及 $f''(x)$.

1.2 习题全解

1. 当 $x = 1, -1, 2$ 时 $f(x) = 0, -3, 4$，求 $f(x)$ 的二次插值多项式．

解 $L_2(x) = f(x_0)l_0(x) + f(x_1)l_1(x) + f(x_2)l_2(x) =$

$$0 + (-3)\frac{(x-1)(x-2)}{(-1-1)(-1-2)} + 4\frac{(x-1)(x+1)}{(2-1)(2+1)} =$$

$$\frac{5}{6}x^2 + \frac{3}{2}x - \frac{7}{3}$$

2. 给出 $f(x) = \ln x$ 数值表如下：

x	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
$\ln x$	−0.916 291	−0.693 147	−0.510 826	−0.356 675	−0.223 144

用线性插值及二次插值计算 ln0.54 的近似值．

解 依据插值误差估计式选距离 0.54 较近的点为插值节点，并建立差商表如下：

$$\begin{array}{lll} x_0 = 0.5 & -0.693\,147 & \\ & & 1.823\,210 \\ x_1 = 0.6 & -0.510\,826 & & -0.204\,115 \\ & & 2.027\,325 \\ x_2 = 0.4 & -0.916\,291 & \end{array}$$

写出 Newton 插值多项式

$$N_1(x) = -0.693\,147 + 1.823\,210(x - 0.5)$$

$$N_2(x) = N_1(x) + (-0.204\,115)(x - 0.5)(x - 0.6)$$

计算近似值

$$N_1(0.54) = -0.693\,147 + 1.823\,210(0.54 - 0.5) = -0.620\,218\,6$$

$$N_2(0.54) = N_1(0.54) - 0.204\,115(0.54 - 0.5)(0.54 - 0.6) = -0.616\,839$$

3. 给出 $\cos x$，$0° \leqslant x \leqslant 90°$，的函数表，步长 $h = 1' = \left(\frac{1}{60}\right)°$，若函数表具有5位有效数字，研究用线性插值求 $\cos x$ 近似值时的总误差界．

解　用函数值及近似值所建立的线性插值多项式为

当 $x \in [x_i, x_{i+1}]$ 时，

$$L_1(x) = f(x_i)\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + f(x_{i+1})\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

$$L_1^*(x) = f^*(x_i)\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + f^*(x_{i+1})\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

式中 $x_i = \frac{i}{60}\frac{\pi}{180} = \frac{\pi i}{10\,800}$ $(i = 0, 1, 2, \cdots, 5\,400)$.

得到误差估计

$$|\cos x - L_1^*(x)| = |\cos x - L_1(x) + L_1(x) - L_1^*(x)| \leqslant$$
$$|\cos x - L_1(x)| + |L_1(x) - L_1^*(x)|$$

可以看出，如果忽略算术运算过程中引入的舍入误差，插值误差包含截断误差 $|\cos x - L_1(x)|$ 及初始数据误差的传播两部分．

截断误差

$$|\cos x - L_1(x)| = \left|\frac{1}{2!}(-\sin\xi)(x - x_i)(x - x_{i+1})\right| \leqslant$$

$$\frac{1}{2}|(x - x_i)(x - x_{i+1})| \leqslant$$

$$\frac{1}{2}\max_{x_i \leqslant x \leqslant x_{i+1}}|(x - x_i)(x - x_{i+1})| \leqslant$$

$$\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}\ \frac{\pi}{10\ 800}\right]^2 \approx 1.06\times 10^{-8}$$

$$x \in [x_i,\ x_{i+1}]$$

舍入误差传播

$$|L_1(x)-L_1^*(x)| = |e(f^*(x_i))|\ \left|\frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i}\right| + |e(f^*(x_{i+1}))|\ \left|\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\right| \leqslant$$

$$\max\{|e(f^*(x_i))|,\ |e(f^*(x_{i+1}))|\}\left(\frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i}+\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\right)=$$

$$\max\{|e(f^*(x_i))|,\ |e(f^*(x_{i+1}))|\}\overset{\text{def}}{=\!=}M_{i,i+1}$$

利用有效数字定义有

$$|e(f^*(x_i))| \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{m_i-5+1} = \frac{1}{2}\times 10^{m_i-4}$$

式中 m_i 为函数值 $f^*(x_i)$ 的量级，故有

$$10^{m_i} \leqslant |f^*(x_i)| < 10^{m_i+1}$$

进而 $$M_{i,i+1} \leqslant \max\left\{\frac{1}{2}\times 10^{m_i-4},\ \frac{1}{2}\times 10^{m_{i+1}-4}\right\} = \frac{1}{2}\times 10^{\max(m_i,\ m_{i+1})-4}$$

故可知

$$|\cos x - L_1^*(x)| \leqslant 1.06\times 10^{-8} + \frac{1}{2}\times 10^{\max(m_i,\ m_{i+1})-4}$$

$$x\in(x_i,\ x_{i+1}),\ i=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ 5\ 399$$

在区间$\left[0,\ \frac{\pi}{2}\right]$上的总误差界为

$$|\cos x - L_1^*(x)| \leqslant 1.06\times 10^{-8} + \frac{1}{2}\times 10^{-5} = 0.501\ 06\times 10^{-5}$$

4. 设 x_j 为互异节点($j=0,1,\cdots,n$)，求证：

(i) $\sum\limits_{j=0}^{n} x_j^k l_j(x) \equiv x^k (k=0,\ 1,\ \cdots,\ n)$；

(ii) $\sum\limits_{j=0}^{n} (x_j - x)^k l_j(x) \equiv 0\ (k=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$.

证明 (i) 令 $f(x)=x^k$，若插值节点为 $x_j(j=0,1,\cdots,n)$，则 $f(x)$ 的 n 次插值多项式为

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^{n} x_j^k l_j(x)$$

插值余项为 $$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

又因为 $k \leqslant n$，所以

$$f^{(n+1)}(\xi) = 0, \quad R_n(x) = 0$$

所以

$$\sum_{j=0}^{n} x_j^k l_j(x) = x^k (k = 0,1,\cdots,n)$$

(ⅱ)

$$\sum_{j=0}^{n}(x_j - x)^k l_j(x) = \sum_{j=0}^{n}\left[l_j(x)\sum_{i=0}^{k}\binom{k}{i}x_j^i(-x)^{k-i}\right] =$$

$$\sum_{j=0}^{n}\sum_{i=0}^{k}\left[\binom{k}{i}x_j^i(-x)^{k-i}l_j(x)\right] =$$

$$\sum_{i=0}^{k}\sum_{j=0}^{n}\left[\binom{k}{i}x_j^i(-x)^{k-i}l_j(x)\right] =$$

$$\sum_{i=0}^{k}\left[\binom{k}{i}(-x)^{k-i}\sum_{j=0}^{n}x_j^i l_j(x)\right] =$$

$$\sum_{i=0}^{k}\binom{k}{i}(-x)^{k-i}x^i = (x-x)^i \equiv 0$$

5. 设 $f(x) \in \mathbf{C}^2[a,b]$ 且 $f(a) = f(b) = 0$. 求证：

$$\max_{a \leqslant x \leqslant b} |f(x)| \leqslant \frac{1}{8}(b-a)^2 \max_{a \leqslant x \leqslant b} |f''(x)|$$

证明　令 $x = a$ 和 $x = b$，以此为插值节点，则插值多项式为

$$L_1(x) = f(a)\frac{x-b}{a-b} + f(b)\frac{x-a}{b-a} \equiv 0$$

应用插值余项公式有

$$|f(x) - L_1(x)| = \left|\frac{1}{2!}f''(\xi)(x-a)(x-b)\right| \leqslant \qquad \xi \in (a,b)$$

$$\frac{1}{2}\max_{a \leqslant x \leqslant b}|f''(\xi)| \max_{a \leqslant x \leqslant b}|(x-a)(x-b)| \leqslant$$

$$\frac{1}{8}(b-a)^2 \max_{a \leqslant x \leqslant b}|f''(x)|$$

6. 在 $-4 \leqslant x \leqslant 4$ 上给出 $f(x) = e^x$ 的等距节点函数表，若用分段二次插值求 e^x 的近似值，要使截断误差不超过 10^{-6}，问使用函数表的步长 h 应取多少？

解　若插值节点为 x_{i-1}，x_i 和 x_{i+1} 则分段二次插值多项式的插值余项为

$$R_2(x) = \frac{1}{3!}f'''(\xi)(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1}), \quad \xi \in (x_{i-1}, x_{i+1})$$

式中 $x_{i-1} = x_i - h$，$x_{i+1} = x_i + h$.

$$|R_2(x)| \leqslant \frac{1}{6}e^4 \max_{x_{i-1}\leqslant x\leqslant x_{i+1}} |(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})| \leqslant$$

$$\frac{1}{6}e^4 \frac{2}{3} \frac{1}{\sqrt{3}}h^3 = \frac{e^4}{9\sqrt{3}}h^3$$

令 $\frac{e^4}{9\sqrt{3}}h^3 \leqslant 10^{-6}$ 得 $h \leqslant 0.006\ 58$.

插值点个数

$$1+\frac{4-(-4)}{0.006\ 58} \approx 1\ 216.8 \leqslant 1\ 217 \xlongequal{\text{def}} N$$

是奇数，故实际可采用的函数值表步长

$$h = \frac{4-(-4)}{N-1} = \frac{8}{1\ 216} \approx 0.006\ 579$$

7. 若 $y_n = 2^n$，求 $\Delta^4 y_n$ 及 $\delta^4 y_n$.

解 根据向前差分算子和中心差分算子的定义进行求解

$$\Delta^4 y_n = (E-I)^4 y_n = \sum_{i=0}^{4}\binom{4}{i}(-1)^{4-i}E^i y_n = \sum_{i=0}^{4}\binom{4}{i}(-1)^{4-i}y_{n+i} =$$

$$\left(\sum_{i=0}^{4}\binom{4}{i}(-1)^{4-i}2^i\right)y_n = (2-1)^4 y_n = y_n = 2^n$$

$$\delta^4 y_n = (E^{\frac{1}{2}} - E^{-\frac{1}{2}})^4 y_n = (E^{-\frac{1}{2}})^4 (E-I)^4 y_n =$$

$$E^{-2}\Delta^4 y_n = E^{-2}(y_n) = y_{n-2} = 2^{n-2}$$

8. 如果 $f(x)$ 是 m 次多项式，记 $\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$. 证明 $f(x)$ 的 k 阶差分 $\Delta^k f(x)(0 \leqslant k \leqslant m)$ 是 $m-k$ 次多项式，并且 $\Delta^{m+l} f(x) = 0$(l 为正整数).

证明 对 m 次多项式 $f(x)$ 应用 Taylor 公式有

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x) = f'(x)h + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \cdots + \frac{h^m}{m!}f^{(m)}(x)$$

即 $\Delta f(x)$ 为 $m-1$ 次的多项式.

$\Delta^2 f(x) = \Delta(\Delta f(x))$，对 $m-1>0$ 次多项式 $\Delta f(x)$ 应用上述推理过程知 $\Delta(\Delta f(x)) = \Delta^2 f(x)$ 是 $m-2$ 次的多项式.

依此过程递推，知 $\Delta^k f(x)(0 \leqslant k \leqslant m)$ 为 $m-k$ 次多项式.

所以 $\Delta^m f(x)$ 为常数，故 $\Delta^{m+l} f(x) \equiv 0$($l$ 为正整数).

9. 证明 $\Delta(f_k g_k) = f_k \Delta g_k + g_{k+1}\Delta f_k$.

证明 $\Delta(f_k g_k) = f_{k+1}g_{k+1} - f_k g_k = f_{k+1}g_{k+1} - f_k g_{k+1} + f_k g_{k+1} - f_k g_k =$

$$g_{k+1}(f_{k+1}-f_k)+f_k(g_{k+1}-g_k)=g_{k+1}\Delta f_k+f_k\Delta g_k$$

10. 证明 $\sum_{k=0}^{n-1} f_k\Delta g_k=f_ng_n-f_0g_0-\sum_{k=0}^{n-1} g_{k+1}\Delta f_k$.

证明　由于

$$\sum_{k=0}^{n-1} f_k\Delta g_k+\sum_{k=0}^{n-1} g_{k+1}\Delta f_k=\sum_{k=0}^{n-1}(f_k\Delta g_k+g_{k+1}\Delta f_k)=\sum_{k=0}^{n-1}\Delta(f_kg_k)=$$

$$\sum_{k=0}^{n-1}(f_{k+1}g_{k+1}-f_kg_k)=f_ng_n-f_0g_0$$

所以
$$\sum_{k=0}^{n-1} f_k\Delta g_k=f_ng_n-f_0g_0-\sum_{k=0}^{n-1} g_{k+1}\Delta f_k$$

11. 证明 $\sum_{j=0}^{n-1}\Delta^2 y_j=\Delta y_n-\Delta y_0$.

证明
$$\sum_{j=0}^{n-1}\Delta^2 y_j=\sum_{j=0}^{n-1}\Delta(\Delta y_j)=\sum_{j=0}^{n-1}(\Delta y_{j+1}-\Delta y_j)=(\Delta y_1-\Delta y_0)$$
$$+(\Delta y_2-\Delta y_1)+\cdots+(\Delta y_n-\Delta y_{n-1})=\Delta y_n-\Delta y_0$$

12. 若 $f(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_{n-1}x^{n-1}+a_nx^n$ 有 n 个不同实根 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，证明：

$$\sum_{j=1}^{n}\frac{x_j^k}{f'(x_j)}=\begin{cases}0, & 0\leqslant k\leqslant n-2\\ a_n^{-1}, & k=n-1\end{cases}$$

证明　因为 $f(x)$ 有 n 个不同实根 $\{x_j\}_{j=1}^n$，且

$$f(x)=a_n(x-x_1)\cdots(x-x_n)=a_nw_n(x)$$

$$\sum_{j=1}^{n}\frac{x_j^k}{f'(x_j)}=\sum_{j=1}^{n}\frac{x_j^k}{a_nw_n'(x_j)}=\frac{1}{a_n}\sum_{j=1}^{n}\frac{x_j^k}{w_n'(x_j)}$$

记 $g(x)=x^k$，并利用差商的函数值表达形式有

$$\sum_{j=1}^{n}\frac{x_j^k}{f'(x_j)}=\frac{1}{a_n}\sum_{j=1}^{n}\frac{g(x_j)}{w_n'(x_j)}=\frac{1}{a_n}g[x_1,x_2,\cdots,x_n]$$

再由差商与导数的关系知

$$\sum_{j=1}^{n}\frac{x_j^k}{f'(x_j)}=\begin{cases}0, & 0\leqslant k\leqslant n-2\\ a_n^{-1}\dfrac{g^{(n-1)}(\xi)}{(n-1)!}=a_n^{-1}, & k=n-1\end{cases}$$

13. 证明 n 阶均差有下列性质：

(ⅰ) 若 $F(x)=cf(x)$，则 $F[x_0,x_1,\cdots,x_n]=cf[x_0,x_1,\cdots,x_n]$；

(ⅱ) 若 $F(x)=f(x)+g(x)$，则

$$F[x_0, x_1, \cdots, x_n] = f[x_0, x_1, \cdots, x_n] + g[x_0, x_1, \cdots, x_n]$$

证明 设 $F(x) = \alpha f(x) + \beta g(x)$，$w_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$. 将差商(均差)用函数值表示，则有

$$F[x_0, x_1, \cdots, x_n] = \sum_{j=0}^{n} \frac{F(x_j)}{w_{n+1}'(x_j)} = \sum_{j=0}^{n} \frac{\alpha f(x_j) + \beta g(x_j)}{w_{n+1}'(x_j)} =$$

$$\alpha \sum_{j=0}^{n} \frac{f(x_j)}{w_{n+1}'(x_j)} + \beta \sum_{j=0}^{n} \frac{g(x_j)}{w_{n+1}'(x_j)} =$$

$$\alpha f[x_0, x_1, \cdots, x_n] + \beta g[x_0, x_1, \cdots, x_n]$$

取 $\beta = 0$，$\alpha = c$ 得结论(i)；取 $\alpha = \beta = 1$ 得结论(ii).

14. $f(x) = x^7 + x^4 + 3x + 1$，求 $f[2^0, 2^1, \cdots, x^7]$ 及 $f[2^0, 2^1, \cdots, 2^8]$.

解 因为 $f(x) = x^7 + x^4 + 3x + 1$，若 $x_i = 2^i (i = 0,1,2,\cdots,8)$，则 $f[x_0, x_1, \cdots, x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi)$

$$f[2^0, 2^1, \cdots, 2^7] = \frac{1}{7!} f^{(7)}(\xi) = 1$$

$$f[2^0, 2^1, \cdots, 2^8] = \frac{1}{8!} f^{(8)}(\xi) = 0$$

15. 证明两点三次 Hermite 插值余项是

$$R_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x - x_k)^2 (x - x_{k+1})^2, \quad \xi \in (x_k, x_{k+1})$$

并由此求出分段三次 Hermite 插值的误差限.

证明 若 $x \in [x_k, x_{k+1}]$，且插值多项式满足条件

$$H_3(x_k) = f(x_k), \quad H_3(x_{k+1}) = f(x_{k+1})$$

$$H_3'(x_k) = f'(x_k), \quad H_3'(x_{k+1}) = f'(x_{k+1})$$

知插值余项 $R(x) = f(x) - H_3(x)$ 有二重零点 x_k 和 x_{k+1}. 故设

$$R(x) = k(x)(x - x_k)^2 (x - x_{k+1})^2$$

确定函数 $k(x)$：

当 $x = x_k$ 或 x_{k+1} 时 $k(x)$ 取任何有限值均可；

当 $x \neq x_k, x_{k+1}$ 时，$x \in (x_k, x_{k+1})$，构造关于变量 t 的函数

$$g(t) = f(t) - H_3(t) - k(x)(t - x_k)^2 (t - x_{k+1})^2$$

显然有

$$g(x_k) = 0, \quad g(x) = 0, \quad g(x_{k+1}) = 0$$

$$g'(x_k) = 0, \quad g'(x_{k+1}) = 0$$

在$[x_k, x]$和$[x, x_{k+1}]$上对$g(x)$使用Rolle定理，存在$\eta_1 \in (x_k, x)$及$\eta_2 \in (x, x_{k+1})$使得

$$g'(\eta_1) = 0, \quad g'(\eta_2) = 0$$

在(x_k, η_1)，(η_1, η_2)，(η_2, x_{k+1})上对$g'(x)$使用Rolle定理，存在$\eta_{k1} \in (x_k, \eta_1)$，$\eta_{12} \in (\eta_1, \eta_2)$和$\eta_{2,k+1} \in (\eta_2, x_{k+1})$使得

$$g''(\eta_{k1}) = g''(\eta_{12}) = g''(\eta_{2,k+1}) = 0$$

再依次对$g''(t)$和$g'''(t)$使用Rolle定理，知至少存在$\xi \in (x_k, x_{k+1})$使得

$$g^{(4)}(\xi) = 0$$

而$g^{(4)}(t) = f^{(4)}(t) - k(x)4!$，将$\xi$代入，得到

$$k(x) = \frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (x_k, x_{k+1})$$

推导过程表明ξ依赖于x_k，x_{k+1}及x.

综合以上过程可知

$$R(x) = \frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)(x - x_k)^2(x - x_{k+1})^2$$

下面建立分段三次Hermite插值的误差限．记$I_h(x)$为$f(x)$在$[a, b]$上的基于等距节点的分段三次Hermite插值函数．$x_k = a + kh(k = 0, 1 \cdots, n)$，$h = \frac{b-a}{n}$.

在小区间$[x_k, x_{k+1}]$上有

$$|f(x) - I_h(x)| = \frac{1}{4!}|f^{(4)}(\xi)|(x - x_k)^2(x - x_{k-1})^2 \leqslant$$

$$\frac{1}{4!}\max_{a \leqslant x \leqslant b}|f^{(4)}(x)|\max_{x_k \leqslant x \leqslant x_{k+1}}(x - x_k)^2(x - x_{k+1})^2$$

而最值

$$\max_{x_k \leqslant x \leqslant x_{k+1}}(x - x_k)^2(x - x_{k+1})^2 \xlongequal{x = x_k + sh} \max_{0 \leqslant s \leqslant 1}s^2(s - 1)^2h^4 = \frac{1}{16}h^4$$

进而得误差估计

$$|f(x) - I_h(x)| \leqslant \frac{1}{384}h^4\max_{a \leqslant x \leqslant b}|f^{(4)}(x)|$$

16. *求一个次数不高于4次的多项式$P(x)$，使它满足$P(0) = P'(0) = 0$，$P(1) = P'(1) = 1$，$P(2) = 1$.*

解法一　利用Hermite插值可得到次数不高于4的多项式

$$x_0 = 0, x_1 = 1; \quad y_0 = 0, y_1 = 1; \quad m_0 = 0, m_1 = 1$$

$$H_3(x) = \sum_{j=0}^{1} y_j \alpha_j(x) + \sum_{j=0}^{1} m_j \beta_j(x)$$

$$\alpha_0(x) = (1 - 2\frac{x - x_0}{x_0 - x_1})(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1})^2 = (1 + 2x)(x - 1)^2$$

$$\alpha_1(x) = (1 - 2\frac{x - x_1}{x_1 - x_0})(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0})^2 = (3 - 2x)x^2$$

$$\beta_0(x) = x(x - 1)^2$$

$$\beta_1 = (x - 1)x^2$$

所以 $$H_3(x) = (3 - 2x)x^2 + (x - 1)x^2 = -x^3 + 2x^2$$

设 $P(x) = H_3(x) + A(x - x_0)^2(x - x_1)^2$，其中，$A$ 为待定常数，令 $P(2) = 1$ 得

$$A = \frac{1}{4}$$

于是

$$P(x) = \frac{1}{4}x^2(x - 3)^2$$

解法二（带重节点的 Newton 插值法） 建立如下差商表：

x	f	一阶	二阶	三阶	四阶
0	0				
		0			
0	0		1		
		1		-1	
1	1		0		$\frac{1}{4}$
		1		$-\frac{1}{2}$	
1	1		-1		
		0			
2	1				

这样可写出 Newton 插值公式

$$P(x) = 0 + 0(x - 0) + 1(x - 0)^2 - 1(x - 0)^2(x - 1) + \frac{1}{4}(x - 0)^2(x - 1)^2 = x^2 - x^2(x - 1) + \frac{1}{4}x^2(x - 1)^2 = \frac{1}{4}x^2(x - 3)^2$$

17. 设 $f(x) = \frac{1}{1 + x^2}$，在 $-5 \leqslant x \leqslant 5$ 上取 $n = 10$，按等距节点求分段线性插值函数 $I_h(x)$，计算各节点间中点处 $I_h(x)$ 与 $f(x)$ 的值，并估计误差．

解 若 $x_0 = 5$，$x_{10} = 5$，则步长 $h = \frac{5 - (-5)}{n} = 1$，$x_i = -5 + ih = -5 + i(0 \leqslant i \leqslant 10)$．在区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上，分段线性插值函数为

$$I_h^{(i)}(x) = f(x_i)\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + f(x_{i+1})\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} =$$

$$\frac{x_{i+1} - x}{1 + x_i^2} + \frac{x - x_i}{1 + x_{i+1}^2}, \qquad i = 0, 1, \cdots, 9$$

分段线性插值函数定义如下：

$$I_h(x) = I_h^{(i)}(x) = \frac{x_{i+1} - x}{1 + x_i^2} + \frac{x - x_i}{1 + x_{i+1}^2}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

各节点间中点处函数值及插值函数值如下所示：

x	± 0.5	± 1.5	± 2.5	± 3.5	± 4.5
$f(x)$	0.800 0	0.307 7	0.137 9	0.075 5	0.047 1
$I_h(x)$	0.750 0	0.350 0	0.150 0	0.079 4	0.048 6

估计误差：在区间$[x_i, x_{i+1}]$上

$$|f(x) - I_h^{(i)}(x)| = \left|\frac{1}{2!}f''(\xi)(x - x_i)(x - x_{i+1})\right| \leqslant$$

$$\frac{1}{2}\max_{-5 \leqslant x \leqslant 5}|f''(x)| \max_{x_i \leqslant x \leqslant x_{i+1}}|(x - x_i)(x - x_{i+1})|$$

而

$$\max_{x_i \leqslant x \leqslant x_{i+1}}|(x - x_i)(x - x_{i+1})| \xlongequal{x = x_i + sh} \max_{0 \leqslant s \leqslant 1}|s(s - 1)| = \frac{1}{4}$$

$$f'(x) = -\frac{2x}{(1 + x^2)^2}, \quad f''(x) = \frac{6x^2 - 2}{(1 + x^2)^3}$$

令 $f'''(x) = \dfrac{24x(1 - x^2)}{(1 + x^2)^4} = 0$ 得 $f''(x)$ 的驻点 $0, \pm 1$，于是

$$\max_{-5 \leqslant x \leqslant 5}\{|f''(x)|\} = \max\{|f''(0)|, |f''(\pm 1)|, |f''(\pm 5)|\} = 2$$

故有结论

$$|f(x) - I_h^{(i)}(x)| \leqslant \frac{1}{2} \times 2 \times \frac{1}{4} = \frac{1}{4}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

右端与 i 无关，故

$$|f(x) - I_h(x)| \leqslant \frac{1}{4}, \quad x \in [-5, 5]$$

18. 求 $f(x) = x^2$ 在$[a, b]$上的分段线性插值函数 $I_h(x)$，并估计误差．

解 在区间$[a,b]$上，$x_0 = a, x_n = b, h_i = x_{i+1} - x_i (0 \leqslant i \leqslant n - 1)$，$h = \max\limits_{0 \leqslant i \leqslant n-1} h_i$．

函数 $f(x)$ 在 $[x_i, x_{i+1}]$ 上的线性插值函数为

$$I_h^{(i)} = f(x_i)\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}} + f(x_{i+1})\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i} = \frac{x_i^2}{h_i}(x_{i+1}-x) + \frac{x_{i+1}^2}{h_i}(x-x_i)$$

分段线性插值函数

$$I_h(x) = I_h^{(i)}(x) = \frac{x_i^2}{h_i}(x_{i+1}-x) + \frac{x_{i+1}^2}{h_i}(x-x_i), \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

误差估计

$$|f(x) - I_h^{(i)}(x)| = \left|\frac{1}{2!}f''(\xi)(x-x_i)(x-x_{i+1})\right| \leqslant$$

$$\frac{1}{2}\max_{a\leqslant x\leqslant b}|f''(x)| \max_{x_i\leqslant x\leqslant x_{i+1}}|(x-x_i)(x-x_{i+1})| =$$

$$\frac{1}{2}\times 2\times\left(\frac{h_i}{2}\right)^2 = \frac{h_i^2}{4}, \quad x\in[x_i, x_{i+1}]$$

故

$$|f(x) - I_h(x)| \leqslant \max_{0\leqslant i\leqslant n-1}|f(x) - I_h^{(i)}(x)| \leqslant \max_{0\leqslant i\leqslant n-1}\frac{h_i^2}{4} = \frac{h^2}{4}$$

19. 求 $f(x) = x^4$ 在 $[a, b]$ 上的分段 Hermite 插值，并估计误差.

解 在区间 $[a,b]$ 上，$x_0 = a, x_n = b, h_i = x_{i+1} - x_i$，令 $h = \max\limits_{0\leqslant i\leqslant n-1} h_i$.

在区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 的 Hermite 插值函数为

$$I_h^{(i)}(x) = x_i^4\left(1-2\frac{x-x_i}{x_i-x_{i+1}}\right)\left(\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\right)^2 + 4x_i^3(x-x_i)\left(\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\right)^2 +$$

$$x_{i+1}^4\left(1-2\frac{x-x_{i+1}}{x_{i+1}-x_i}\right)\left(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\right)^2 +$$

$$4x_{i+1}^3(x-x_{i+1})\left(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\right)^2, \quad x\in[x_i, x_{i+1}]$$

估计误差

$$|f(x) - I_h^{(i)}(x)| = \left|\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)(x-x_i)^2(x-x_{i+1})^2\right| \leqslant$$

$$\frac{1}{24}\max_{a\leqslant x\leqslant b}|f^{(4)}(x)| \max_{x_i\leqslant x\leqslant x_{i+1}}|(x-x_i)(x-x_{i+1})|^2 =$$

$$\frac{1}{24}\times 24\times\left[\frac{h_i}{2}\right]^4 = \frac{h_i^4}{16}, \quad x\in[x_i, x_{i+1}]$$

对于 $I_h(x)$ 有

$$|f(x) - I_h(x)| \leqslant \max_{0\leqslant i\leqslant n-1}|f(x) - I_h^{(i)}(x)| \leqslant \max_{0\leqslant i\leqslant n-1}\frac{h_i^4}{16} = \frac{h^4}{16}$$

20. 给定数据表如下：

x_j	0.25	0.30	0.39	0.45	0.53
y_j	0.500 0	0.547 7	0.624 5	0.670 8	0.728 0

试求三次样条插值 $S(x)$，并满足条件

（ⅰ）$S'(0.25)=1.000\,0$，$S'(0.53)=0.686\,8$；

（ⅱ）$S''(0.25)=S''(0.53)=0$.

解 $h_0=0.30-0.25=0.05$，$h_1=0.39-0.30=0.09$

$h_2=0.45-0.39=0.06$，$h_3=0.53-0.45=0.08$

由 $\mu_j=\dfrac{h_{j-1}}{h_{j-1}+h_j}$，$\lambda_j=\dfrac{h_j}{h_{j-1}+h_j}$ 得

$$\mu_1=\frac{5}{14},\quad \lambda_1=\frac{9}{14}$$

$$\mu_2=\frac{3}{5},\quad \lambda_2=\frac{2}{5}$$

$$\mu_3=\frac{3}{7},\quad \lambda_3=\frac{4}{7}$$

建立差商（均差）表

x	$f(x)$	一阶	二阶
0.25	0.500 0		
		1.000 0	
0.25	0.500 0		$-0.920\,0=f[x_0,x_0,x_1]$
		0.954 0	
0.30	0.547 7		$-0.719\,3=f[x_0,x_1,x_2]$
		0.853 3	
0.39	0.624 5		$-0.544\,0=f[x_1,x_2,x_3]$
		0.771 7	
0.45	0.670 8		$-0.405\,0=f[x_2,x_3,x_4]$
		0.715 0	
0.53	0.728 0		$-0.352\,5=f[x_3,x_4,x_4]$
		0.686 8	
0.53	0.728 0		

（ⅰ）已知一阶导数边界条件，弯矩方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & \\ \frac{5}{14} & 2 & \frac{9}{14} & & \\ & \frac{3}{5} & 2 & \frac{2}{5} & \\ & & \frac{3}{7} & 2 & \frac{4}{7} \\ & & & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ M_4 \end{bmatrix} = 6 \begin{bmatrix} -0.9200 \\ -0.7193 \\ -0.5440 \\ -0.4050 \\ -0.3525 \end{bmatrix}$$

解此方程得

$$M_0 = -2.0278, \quad M_1 = -1.4643, \quad M_2 = -1.0313$$
$$M_3 = -0.8072, \quad M_4 = -0.6539$$

三次样条表达式为

$$S(x) = \begin{cases} 1.8783x^3 - 2.4227x^2 + 1.8591x - 0.1573, x \in [0.25, 0.30] \\ 0.8019x^3 - 1.4538x^2 + 1.5685x + 0.1863, x \in [0.30, 0.39] \\ 0.6225x^3 - 1.2440x^2 + 1.4866x + 0.1970, x \in [0.39, 0.45] \\ 0.3194x^3 - 0.8348x^2 + 1.3025x + 0.2246, x \in [0.45, 0.53] \end{cases}$$

(ⅱ) 已知二阶导数边界条件, $M_0 = M_4 = 0$, 弯矩方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & \frac{9}{14} & 0 \\ \frac{3}{5} & 2 & \frac{2}{5} \\ 0 & \frac{3}{7} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{bmatrix} = 6 \begin{bmatrix} -0.7193 \\ -0.5440 \\ -0.4050 \end{bmatrix}$$

解此方程得

$$M_1 = -1.8809, \quad M_2 = -0.8616, \quad M_3 = -1.0304$$

三次样条表达式为

$$S(x) = \begin{cases} -6.2697x^3 + 4.7023x^2 - 0.2059x + 0.3555, & x \in [0.25, 0.30] \\ 1.8876x^3 - 2.6393x^2 + 1.9966x + 0.1353, & x \in [0.30, 0.39] \\ -0.4689x^3 + 0.1178x^2 + 0.9213x + 0.2751, & x \in [0.39, 0.45] \\ 2.1467x^3 - 3.4132x^2 + 2.5103x + 0.0367, & x \in [0.45, 0.53] \end{cases}$$

21. 若 $f(x) \in \mathbf{C}^2[a, b]$, $S(x)$ 是三次样条函数. 证明:

(ⅰ) $\int_a^b [f''(x)]^2 \mathrm{d}x - \int_a^b [S''(x)]^2 \mathrm{d}x = \int_a^b [f''(x) - S''(x)]^2 \mathrm{d}x +$

$$2\int_a^b S''(x)[f''(x)-S''(x)]\mathrm{d}x$$

(ⅱ) 若 $f(x_i)=S(x_i)(i=0,1,\cdots,n)$，式中 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 是插值节点且有 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$，则

$$\int_a^b S''(x)[f''(x)-S''(x)]\mathrm{d}x = S''(b)[f'(b)-S'(b)]-S''(a)[f'(a)-S'(a)]$$

证明　(ⅰ) 左边 $=\int_a^b[f''(x)]^2\mathrm{d}x+\int_a^b[S''(x)]^2\mathrm{d}x-$

$$2\int_a^b f''(x)S''(x)\mathrm{d}x=$$

$$\int_a^b[f''(x)]^2\mathrm{d}x-\int_a^b[S''(x)]^2\mathrm{d}x+$$

$$2\int_a^b S''(x)[S''(x)-f''(x)]\mathrm{d}x$$

从而有

$$\int_a^b[f''(x)]^2\mathrm{d}x-\int_a^b[S''(x)]^2\mathrm{d}x=\int_a^b[f''(x)-S''(x)]^2\mathrm{d}x+$$

$$2\int_a^b S''(x)[f''(x)-S''(x)]\mathrm{d}x$$

(ⅱ) 左边 $=\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}}S''(x)\mathrm{d}[f'(x)-S'(x)]=$

$$\sum_{k=0}^{n-1}S''(x)[f'(x)-S'(x)]_{x_k}^{x_{k+1}}-$$

$$\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}}[f'(x)-S'(x)]S'''(x)\mathrm{d}x=$$

$$S''(x_n)[f'(x_n)-S'(x_n)]-$$

$$S''(x_0)[f'(x_0)-S'(x_0)]-$$

$$\sum_{k=0}^{n-1}S'''\left(\frac{x_{k-1}+x_k}{2}\right)\int_{x_k}^{x_{k+1}}[f'(x)-S'(x)]\mathrm{d}x=$$

($S'''(x)$ 为常数，$x\in(x_k,x_{k+1})$)

$$S''(b)[f'(b)-S'(b)]-$$

$$S''(a)[f'(a)-S'(a)]+$$

$$\sum_{k=0}^{n-1}S'''\left(\frac{x_{k+1}+x_k}{2}\right)[f(x)-S(x)]_{x_k}^{x_{k+1}}=$$

$$S''(b)[f'(b)-S'(b)]-S''(a)[f'(a)-S'(a)]$$

第3章 函数逼近与曲线拟合

1.1 重点、难点全析

1.1.1 函数逼近

1. 概念

对函数类 A 中给定的函数 $f(x)$，在另一类简单的便于计算的函数类 B 中求函数 $p(x)$，使 $p(x)$ 与 $f(x)$ 的误差在某种度量意义下最小．

（1）最佳一致多项式逼近问题．设 $f(x)\in C[a,b]$，求 $p_n^*(x)\in H_n \xlongequal{\text{def}} \text{span}\{1, x, \cdots, x^n\}$ 使

$$\| f-p_n^* \|_\infty = \min_{p_n\in H_n} \| f-p_n \|_\infty$$

式中 $\| f-p_n \|_\infty \xlongequal{\text{def}} \max\limits_{a\leqslant x\leqslant b} | f(x)-p_n(x) |$．

（2）最佳平方逼近问题．设 $f(x)\in C[a, b]$，求 $S^*(x)\in \Phi \xlongequal{\text{def}} \text{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}\subset C[a, b]$，使得

$$\| f-S^* \|_2^2 = \min_{S\in\Phi} \| f-S \|_2^2$$

式中 $\| f-S \|_2^2 \xlongequal{\text{def}} \int_a^b [f(x)-S(x)]^2\rho(x)\mathrm{d}x$．

（3）最佳平方三角逼近问题．取 $\Phi=\text{span}\{1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \cdots\}$ 的最佳平方逼近问题．

（4）有理逼近问题．用形如

$$R_{nm}(x) \xlongequal{\text{def}} \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} = \frac{\sum\limits_{k=0}^{n} a_k x^k}{\sum\limits_{k=0}^{m} b_k x^k}$$

的函数近似 $f(x)\in C[a, b]$，使得 $\| f(x)-R_{nm}(x) \|_\infty$ 最小的问题称为最佳

有理一致逼近，使得 $\| f(x)-R_{nm}(x)\|_2$ 最小的问题为最佳有理平方逼近.

2. 魏尔斯特拉斯(Weierstrass)定理及伯恩斯坦(Bernstein)多项式

(1) 魏尔斯特拉斯定理. 设 $f(x)\in \mathbf{C}[a,b]$，则对任何 $\varepsilon>0$，总存在一个代数多项式 $p(x)$，使

$$\| f(x)-p(x)\|_\infty<\varepsilon$$

在 $[a,b]$ 上一致成立.

(2) 伯恩斯坦多项式

$$B_n(f,x)=\sum_{k=0}^{n} f\left(\frac{k}{n}\right)P_k(x),\quad P_k(x)\xlongequal{\text{def}}\binom{n}{k}x^k(1-x)^{n-k}$$

收敛性　若 $f(x)\in \mathbf{C}^m[0,1]$，则　$\lim\limits_{n\to\infty}B_n^{(m)}(f,x)=f^{(m)}(x)$

单位分解　$$\sum_{k=0}^{n}|P_k(x)|=\sum_{k=0}^{n}P_k(x)=(x+x-1)^k\equiv 1$$

$$0\leqslant x\leqslant 1$$

稳定性　$$|B_n(f,x)|\leqslant \max_{0\leqslant x\leqslant 1}|f(x)|=\|f\|_\infty$$

1.1.2　范数、内积

1. 范数

(1) 定义：设有定义于线性空间 S 上的实值函数 $\|\cdot\|$ 满足条件：

(1) $\|x\|\geqslant 0$，当且仅当 $x=0$ 时 $\|x\|=0$；(正定性)

(2) $\|\alpha x\|=|\alpha|\,\|x\|$；(奇次性)

(3) $\|x+y\|\leqslant\|x\|+\|y\|$；(三角不等式)

则称 $\|\cdot\|$ 为线性空间 S 上的一种范数，S 与 $\|\cdot\|$ 称为赋范线性空间.

(2) $\mathbf{R}^n$ 上的常用范数：

$\|x\|_\infty=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|x_i|$；($\infty$-范数或最大范数)

$\|x\|_1=\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i|$；(1-范数)

$\|x\|_2=\left(\sum\limits_{i=1}^{n}x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$.(2-范数)

(3) $\mathbf{C}[a,b]$ 上的常用范数：

$\|f\|_\infty=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f(x)|$；($\infty$-范数)

$\|f\|_1=\int_a^b|f(x)|\,\mathrm{d}x$；(1-范数)

$\|f\|_2 = \left(\int_a^b f^2(x)\mathrm{d}x\right)^{1/2}$. (2-范数)

2. 内积

(1) 定义：设 X 是数域 $\mathbf{K}$($\mathbf{R}$ 或 $\mathbf{C}$) 上的线性空间，$(\cdot,\cdot)$ 是定义于 $X\times X$ 到 $\mathbf{K}$ 上的二元函数，且满足

共轭对称性　$\forall u, v\in X$ 有 $(u, v)=\overline{(v, u)}$；

线性组合性　$\forall u, v, w\in X$, $a, b\in K$ 有 $(au+bv, w)=a(u, w)+b(v, w)$；

正定性　$\forall u\in X$ 有 $(u, u)\geqslant 0$，当且仅当 $u=0$ 时 $(u, u)=0$；

则称 $(\cdot,\cdot)$ 是 X 上的一种内积．定义了内积的线性空间称为内积空间．

(2) 正交：若内积空间中的元素 u, v 满足 $(u, v)=0$，则称 u, v 关于内积 $(\cdot,\cdot)$ 正交．

(3) 柯西-施瓦茨(Cauchy－Schwarz) 不等式：

$$|(u, v)|^2\leqslant (u, u)(v, v)$$

(4) **定理3.1**　内积空间 X 中的元素列 $\{u_i\}_{i=1}^n$ 线性无关的充分必要条件是格拉姆(Gram) 矩阵 $\boldsymbol{G}$ 非奇异，即 $\det(\boldsymbol{G})\neq 0$，这里

$$\boldsymbol{G}\xlongequal{\text{def}}\begin{pmatrix}(u_1, u_1) & (u_2, u_1) & \cdots & (u_n, u_1)\\ (u_1, u_2) & (u_2, u_2) & \cdots & (u_n, u_2)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ (u_1, u_n) & (u_2, u_n) & \cdots & (u_n, u_n)\end{pmatrix}$$

(5) 内积诱导范数 $(u, u)^{\frac{1}{2}}$.

(6) 以上关于内积的结论对于带权内积也成立．

1.1.3　正交多项式

1. 定义

多项式序列 $\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^{+\infty}$ 如果满足

$$(\varphi_j, \varphi_k)_\rho\xlongequal{\text{def}}\int_a^b\rho(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x)\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & j\neq k\\ A_k>0, & j=k\end{cases}\quad (j, k=0, 1, \cdots)$$

则称 $\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^{+\infty}$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 n 次正交多项式系．这里 $\varphi_n(x)$ 是首项系数不为零的 n 次多项式 $(n=0, 1, \cdots)$.

2. 正交多项式系的性质

(1) 线性无关性：$\{\varphi_n\}_{n=0}^{+\infty}$ 中的任意有限子序列均线性无关；进而，任何不超

过 n 次的多项式均可以用 $\{\varphi_k\}_{k=0}^{n}$ 线性表出．

(2) φ_k 与所有小于 k 次的多项式正交．

(3) φ_k 在 (a, b) 内有 k 个互不相同的实零点．

(4) 当 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{+\infty}$ 是首项系数为1的正交多项式系时有如下递推关系

$$\varphi_{n+1} = (x - \alpha_n)\varphi_n - \beta_n\varphi_{n-1}, \quad n = 0, 1, \cdots \tag{3.1}$$

式中

$$\varphi_0 = 1, \varphi_{-1} = 0, \alpha_n = \frac{(x\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_n, \varphi_n)}, \beta_n = \frac{(\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})}, \quad n = 1, 2, \cdots$$

3. 斯密特(Schmidt)正交化方法构造正交多项式系

$$\varphi_0 = 1, \varphi_n = x^n - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x^n, \varphi_j)}{(\varphi_j, \varphi_j)}\varphi_j, \quad n = 1, 2, \cdots$$

4. 常用正交多项式系

(1) 勒让德(Legendre)多项式是 $[-1, 1]$ 上带权函数 $\rho(x) \equiv 1$ 的正交多项式系．定义为

$$P_0(x) = 1, P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\{(x^2 - 1)^n\}, \quad n = 1, 2, \cdots$$

并具有下列主要特征：

(i) $(P_n, P_n) = \dfrac{2}{2n+1}$, $n = 0, 1, \cdots$;

(ii) n 为偶数时 $P_n(x)$ 为偶函数，n 为奇数时 $P_n(x)$ 为奇函数；

(iii) $P_n(x)$ 在 $(-1, 1)$ 内有 n 个不同的实零点．

(iv) 首项系数为1的勒让德多项式 $\tilde{P}_n(x)$ 是所有首项系数为1的 n 次多项式集合中在 $\|\cdot\|_2$ 意义下距离零最近的元素．

(2) 切比雪夫(Chebyshev)多项式是 $[-1, 1]$ 上带权函数 $\rho(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式系．定义为

$$T_n(x) = \cos(n\arccos x), \quad n = 0, 1, \cdots$$

并且具有下列主要性质：

(i) $T_n(x)$ 最高次项系数是 $2^{n-1}(n \geqslant 1)$.

(ii) $(T_0, T_0) = \pi$, $(T_n, T_n) = \dfrac{\pi}{2}$ $(n = 1, 2, \cdots)$.

(iii) n 为偶数时 $T_n(x)$ 为偶函数，n 为奇数时 $T_n(x)$ 为奇函数．

(iv) $T_n(x)$ 在 $(-1, 1)$ 内的 n 个零点 $x_k = \cos\dfrac{2k-1}{2n}\pi$, $k = 1, 2, \cdots, n$.

在 $\beta_k = \cos\frac{k\pi}{n}(k=0, 1, \cdots, n)$ 点处交错取最大值 1,最小值 −1.

(v) $\widetilde{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$ 是所有首项系数为 1 的 n 次多项式集合中在 $\|\cdot\|_\infty$ 下距离零最近的元素.

1.1.4 最佳一致逼近多项式

1. 定义

(1) 偏差 $\Delta(f, P_n) \xlongequal{\text{def}} \|f-P_n\|_\infty$, $f(x)\in \mathbf{C}[a, b]$, $P_n(x)\in H_n$.

(2) 最小偏差 $E_n \xlongequal{\text{def}} \inf\limits_{P_n\in H_n}\{\Delta(f, P_n)\}$.

(3) 最佳一致逼近多项式。如果 $P_n^*(x)\in H_n$使得 $\Delta(f, P_n^*)=E_n$,则称 $P_n^*(x)$ 是 $f(x)\in \mathbf{C}[a, b]$ 在$[a, b]$ 上的最佳一致逼近多项式或最小偏差逼近多项式,简称最佳逼近多项式.

2. 存在性及唯一性

定理 3.2 若 $f(x)\in \mathbf{C}[a,b]$,则存在唯一的多项式 $P_n^*(x)\in H_n$,使得 $\|f(x)-P_n^*(x)\|_\infty = E_n$,即

$$\Delta(f, P_n^*) = E_n$$

3. 切比雪夫定理

(1) 定义:若 $P(x_0)-f(x_0) = \|P(x)-f(x)\|_\infty$,称 x_0 是 $P(x)$ 的正偏差点;若 $P(x)-f(x_0) = -\|P(x)-f(x)\|_\infty$,称 x_0 是 $P(x)$ 的负偏差点.

(2) **定理 3.3** $P(x)\in H_n$ 是 $f(x)\in \mathbf{C}[a, b]$ 的最佳一致逼近多项式的充分必要条件是 $P(x)$ 在$[a, b]$ 上至少有 $n+2$ 个轮流为正、负的偏差点,即有 $n+2$ 个点 $a\leqslant x_1 < x_2 < \cdots < x_{n+2}\leqslant b$,使得

$$P(x_k)-f(x_k) = (-1)^k\sigma\|P(x)-f(x)\|_\infty, \quad \sigma=\pm 1$$

这样的点组称为切比雪夫交错点组.

4. 在 $\widetilde{H}_n \xlongequal{\text{def}} \left\{x^n+\sum\limits_{i=0}^{n-1}a_ix^i, a_i\in \mathbf{R}, 0\leqslant i\leqslant n-1\right\}$上的最佳一致逼近

定理 3.4 设 $f(x)\in \mathbf{C}[-1, 1]$, $\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)\in \widetilde{H}_n$ 是 $f(x)$ 在 $\widetilde{H}_n$ 中的最佳一致逼近多项式,偏差为$\frac{1}{2^{n-1}}$.

5. 最佳一次逼近多项式

设 $f(x)=\mathbf{C}^2[a,b]$ 且 $f''(x)$ 在 (a,b) 内不变号，则 $f(x)$ 的最佳一致一次逼近多项式为

$$P_1(x)=\frac{1}{2}[f(a)+f(x_2)]+a_1\left(x-\frac{a+x_2}{2}\right)$$

$$a_1=\frac{f(b)-f(a)}{b-a}=f'(x_2)$$

交错点组为 a,x_2 和 b.

1.1.5 最佳平方逼近

1. $f(x)\in\mathbf{C}[a,b]$ 在 $\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\}\subset\mathbf{C}[a,b]$ 上的最佳平方逼近 $S=a_0\varphi_0+a_1\varphi_2+\cdots+a_n\varphi_n$，系数 $\{a_i\}_{i=0}^n$ 是法方程组

$$\boldsymbol{G}_n\xlongequal{\text{def}}\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)\\(\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n)\\\vdots & \vdots & & \vdots\\(\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(f,\varphi_0)\\(f,\varphi_1)\\\vdots\\(f,\varphi_n)\end{bmatrix}\tag{3.2}$$

的解向量，平方误差为

$$\|\delta(x)\|_2^2\xlongequal{\text{def}}\|f-S\|_2^2=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^n a_k(f,\varphi_k)\tag{3.3}$$

式中内积和2-范数分别定义为

$$(f,g)=\int_a^b fg\rho\,\mathrm{d}x,\quad \|f\|_2=(f,f)^{\frac{1}{2}}$$

2. 基于正交基的最佳平方逼近

设 $f(x)\in\mathbf{C}[a,b]$，函数簇 Φ 有正交基 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$.

(1) 表达形式。f 在 Φ 中的最佳平方逼近

$$S^*=\sum_{k=0}^n a_k\varphi_k=\sum_{k=0}^n\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}\varphi_k\tag{3.4}$$

平方误差

$$\|\delta\|_2^2=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^n a_k(\varphi_k,f)=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^n\frac{(f,\varphi_k)^2}{\|\varphi_k\|_2^2}$$

(2) 贝塞尔(Bessel)不等式

$$\sum_{k=0}^n a_k^2\|\varphi_k\|_2^2\leqslant\|f\|_2^2\tag{3.5}$$

3. 广义傅里叶(Fourier)级数

设$\{\varphi_j\}_{j=0}^{+\infty}$是区间$[a,b]$上权函数为$\rho(x)$的正交函数系，且有$\{\varphi_j\}_{j=0}^{+\infty}\subset$ $\mathrm{C}[a,b]$，$f\in \mathrm{C}[a,b]$，称

$$\sum_{k=0}^{+\infty} a_k\varphi_k=\sum_{k=0}^{+\infty}\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}\varphi_k$$

为f的广义傅里叶级数．

4. 勒让德多项式$\tilde{P}_n$是零函数在$\tilde{H}_n$中的最佳平方逼近($\rho(x)\equiv 1,-1\leqslant x\leqslant 1$)．

1.1.6　最小二乘曲线拟合

(1) 线性空间中的最小二乘曲线拟合问题．已知数据$\{(x_j,f(x_j))\}_{j=0}^{m}$，在$\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\}$中求一函数$S^*(x)$使得

$$\sum_{j=0}^{m} w(x_j)[S^*(x_j)-f(x_j)]^2$$

最小．这里$\{w(x_j)\}_{j=0}^{m}$是权系数，均大于零．

(2) 最小二乘解$S(x)=\sum\limits_{k=0}^{n}a_k\varphi_k$的系数满足的法方程组的形式同式(3.2)，只须将其中内积换为如下离散形式的内积：

$$(f,g)=\sum_{j=0}^{m} w(x_j)f(x_j)g(x_j) \tag{3.6}$$

(3) 存在唯一性．当$\{\varphi_k\}_{k=0}^{n}$关于点集$\{x_j\}_{j=0}^{m}$满足哈尔(Haar)条件时，则有法方程组存在唯一解向量．

哈尔条件：$\{\varphi_k\}_{k=0}^{n}\subset \mathrm{C}[a,b]$的任意系数不全为0的线性组合在点集$\{x_j\}_{j=0}^{m}(m\geqslant n)$中至多有$n$个不同的零点($\{\varphi_k\}_{k=0}^{n}$是线性无关的函数组)．

(4) 用关于点集的正交多项式做最小二乘拟合．关于点集正交多项式构造方法同式(3.1)，只须将其中内积换为离散内积式(3.6)．用该正交多项式构造最小二乘拟合解形式同式(3.4)．

1.1.7　基于三角函数系的最佳平方逼近和最小二乘拟合

1. 最佳平方逼近

设$f(x)$是以2π为周期的平方可积函数．

(1) $f(x)$在$[0,2\pi]$上的最佳平方逼近$S_n(x)$为

$$S_n(x)=\frac{1}{2}a_0+\sum_{k=1}^{n}(a_k\cos kx+b_k\sin kx)$$

式中傅里叶系数 a_k, b_k 定义为

$$a_k = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\cos kx\,\mathrm{d}x, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

$$b_k = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\sin kx\,\mathrm{d}x, \quad k = 1, 2, \cdots$$

(2) $f(x)$ 的傅里叶级数

$$f(x) \sim \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{+\infty}(a_k\cos kx + b_k\sin kx)$$

(3) 当 $f'(x)$ 在$[0, 2\pi]$上分段连续时,则有

$$\frac{f(x+0)+f(x-0)}{2} = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{+\infty}(a_k\cos kx + b_k\sin kx)$$

(4) 平方误差

$$\| f - S_n \|_2^2 = \| f \|_2^2 - \pi\left[\frac{1}{2}a_0^2 + \sum_{k=1}^{n}(a_k^2 + b_k^2)\right]$$

(5) 贝塞尔不等式

$$\frac{1}{2}a_0^2 + \sum_{k=1}^{n}(a_k^2 + b_k^2) \leqslant \frac{1}{\pi}\| f \|_2^2$$

2. 基于正交基的最小二乘拟合

(1) $f(x)$ 为实值时:

$\{1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \cdots, \cos mx, \sin mx\}$ 关于点集 $\left\{x_j = \frac{2\pi j}{2m+1}\right\}_{j=0}^{2m}$ 正交.

$f(x)$ 的最小二乘三角逼近为

$$S_n(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{n}(a_k\cos kx + b_k\sin kx) \quad (n \leqslant m)$$

式中

$$a_k = \frac{2}{2m+1}\sum_{j=0}^{2m} f(x_j)\cos\frac{2\pi jk}{2m+1}, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

$$b_k = \frac{2}{2m+1}\sum_{j=0}^{2m} f(x_j)\sin\frac{2\pi jk}{2m+1}, \quad k = 1, 2, \cdots, n$$

特别地,当 $n = m$ 时,$S_m(x)$ 是关于$\{x_j\}_{j=0}^{2m}$ 的三角插值函数.

(2) $f(x)$ 为复值时:

已知 $f(x)$ 在 $\left\{x_j = \frac{2\pi}{N}j\right\}_{j=0}^{N-1}$ 上的值 $\left\{f_j = f\left(\frac{2\pi}{N}j\right)\right\}_{j=0}^{N-1}$, 且 $\{1, e^{ix},$

e^{i2x}，…，$e^{i(N-1)x}\}$ 关于点集 $\left\{x_j=\frac{2\pi}{N}j\right\}_{j=0}^{N-1}$ 是正交的．

$f(x)$ 关于 $\left\{\frac{2\pi}{N}j\right\}_{j=0}^{N-1}$ 的最小二乘逼近为

$$S(x)=\sum_{k=0}^{n-1}C_k e^{ikx},\quad n\leqslant N \tag{3.7}$$

式中
$$C_k=\frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N-1}f_j e^{-ik\frac{2\pi}{N}j},\quad k=0,1,\cdots,N-1 \tag{3.8}$$

特别地，$n=N$ 时 $S(x)$ 是关于 $\left\{\frac{2\pi}{N}j\right\}_{j=0}^{N-1}$ 的插值，即

$$f_j=\sum_{k=0}^{N-1}C_k e^{ik\frac{2\pi}{N}j},\quad j=0,1,\cdots,N-1 \tag{3.9}$$

式(3.8)和式(3.9)分别被称为离散傅里叶变换和反变换．

1.1.8 帕德(Pade)逼近

1. 定义

设 $f(x)\in C^{N+1}(-a,a)$，$N=n+m$，如果有理函数

$$R_{nm}(x)=\frac{a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n}{1+b_1x+\cdots+b_mx^m}=\frac{P_n(x)}{Q_m(x)}$$

其中 $P_n(x)$ 与 $Q_m(x)$ 无公因式，且满足条件

$$R_{nm}^{(k)}(0)=f^{(k)}(0),\quad k=0,1,\cdots,N$$

则称 $R_{nm}(x)$ 为函数 $f(x)$ 在 $x=0$ 处的(n,m)阶帕德逼近．

2. 参数 $\{a_j\}_{j=0}^{n}$，$\{b_j\}_{j=1}^{m}$ 的确定

引入符号 $c_j=\frac{1}{j!}f^{(j)}(0)$，$j=0,1,2,\cdots,n+m$．$\{b_j\}_{j=1}^{m}$ 是方程组 $\boldsymbol{H}\bar{b}=\bar{c}$ 的解，其中

$$\boldsymbol{H}=\begin{bmatrix} c_{n-m+1} & \cdots & c_{n-1} & c_n \\ c_{n-m+2} & \cdots & c_n & c_{n+1} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ c_n & \cdots & c_{n+m-2} & c_{n+m-1}\end{bmatrix},\quad \bar{b}=\begin{bmatrix} b_m \\ b_{m-1} \\ \vdots \\ b_1\end{bmatrix},\quad \bar{c}=\begin{bmatrix} c_{n+1} \\ c_{n+2} \\ \vdots \\ c_{n+m}\end{bmatrix}$$

当 $j<0$ 时约定 $c_j=0$，$b_0=1$，当 $j>m$ 时 $b_j=0$．

$\{a_k\}_{k=0}^{n}$ 由 $a_k=\sum_{j=0}^{k-1}c_jb_{k-j}+c_k$ 确定．

3. 有理函数的函数值可转化为连分式函数值的计算，这样可以节省乘除法

的运算次数.

4. 截断误差

$$f(x)-R_{nm}(x)=\frac{x^{n+m+1}\sum_{l=0}^{+\infty}r_l x^l}{Q_m(x)},\quad r_l \overset{\text{def}}{=\!=} \sum_{k=0}^{m} b_k c_{n+m+l+1-k}$$

当 $|x|<1$ 时误差近似表达式为

$$f(x)-R_{nm}(x)\approx r_0 x^{n+m+1},\quad r_0 \overset{\text{def}}{=\!=} \sum_{k=0}^{m} b_k c_{n+m+1-k}$$

1.2　习题全解

1. $f(x)=\sin\frac{\pi}{2}x$，给出 $[0,1]$ 上的伯恩斯坦多项式 $B_1(f,x)$ 及 $B_3(f,x)$.

解　伯恩斯坦多项式为　$B_n(f,x)=\sum_{k=0}^{n} f\left(\frac{k}{n}\right)\binom{n}{k}x^k(1-x)^{n-k}$

当 $n=1$ 时，

$$B_1(f,x)=f(0)\binom{1}{0}x^0(1-x)^{1-0}+f(1)\binom{1}{1}x^1(1-x)^{1-1}=$$

$$0+\sin\frac{\pi}{2}\times 1\times x\times 1=x$$

当 $n=3$ 时，

$$B_3(f,x)=f\left(\frac{0}{3}\right)\binom{3}{0}x^0(1-x)^{3-0}+f\left(\frac{1}{3}\right)\binom{3}{1}x^1(1-x)^{3-1}+$$

$$f\left(\frac{2}{3}\right)\binom{3}{2}x^2(1-x)^{3-2}+f\left(\frac{3}{3}\right)\binom{3}{3}x^3(1-x)^{3-3}=$$

$$0+\sin\frac{\pi}{6}\times 3\times x(1-x)^2+\sin\frac{\pi}{3}\times 3\times x^2(1-x)+$$

$$\sin\frac{\pi}{2}\times 1\times x^3\times 1=x^3\,\frac{5-3\sqrt{3}}{2}+x^2\,\frac{3\sqrt{3}-6}{2}+x\times\frac{3}{2}\approx$$

$$-0.098x^3-0.402x^2+1.5x$$

2. 当 $f(x)=x$ 时，求证 $B_n(f,x)=x$.

证明　若 $f(x)=x$，则

$$B_n(f,x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{k}{n}\binom{n}{k}x^k(1-x)^{n-k}=\sum_{k=1}^{n}\frac{k}{n}\binom{n}{k}x^k(1-x)^{n-k}=$$

$$\sum_{k=1}^{n}\frac{k}{n}\frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{k!}x^k(1-x)^{n-k}=$$

$$\left[\sum_{k=1}^{n}\frac{(n-1)(n-2)\cdots(n-k+1)}{(k-1)!}x^{k-1}(1-x)^{n-k}\right]x\xlongequal{m=k-1}$$

$$\left[\sum_{m=0}^{n-1}\frac{(n-1)(n-2)\cdots(n-1-m+1)}{m!}x^m(1-x)^{n-1-m}\right]x=$$

$$[x+(1-x)]^{n-1}x=x$$

3. 证明函数 $1,x,\cdots,x^n$ 线性无关.

证明　只须证明如下等式:

$$a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_nx^n=0,\quad\forall x\in\mathbf{R}$$

只有零解 $\boldsymbol{a}=(a_0,a_1,\cdots,a_n)^T=\mathbf{0}$. 为此,分别取 $x^k(k=0,1,\cdots,n)$,对上式两端在$[0,1]$上作带权函数 $\rho(x)\equiv 1$ 的内积,得

$$\begin{bmatrix}1&\frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\cdots&\frac{1}{n+1}\\ \frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\frac{1}{4}&\cdots&\frac{1}{n+2}\\ \vdots&\vdots&\vdots&&\vdots\\ \frac{1}{n+1}&\frac{1}{n+2}&\frac{1}{n+3}&\cdots&\frac{1}{2n+1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\\a_2\\ \vdots\\a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\ \vdots\\0\end{bmatrix}$$

该方程组的系数矩阵为希尔伯特矩阵,对称正定非奇异,故只有零解 $\boldsymbol{a}=\mathbf{0}$. 因此函数 $1,x,x^2,\cdots,x^n$ 线性无关.

4. 计算下列函数 $f(x)$ 在 $\mathbf{C}[0,1]$ 上的 $\|f\|_\infty$, $\|f\|_1$ 与 $\|f\|_2$:

(1) $f(x)=(x-1)^3$;　　(2) $f(x)=\left|x-\frac{1}{2}\right|$;

(3) $f(x)=x^m(1-x)^n$, m,n 为正整数;

(4) $f(x)=(x+1)^{10}e^{-x}$.

解　(1) $f'(x)=3(x-1)^2\geqslant 0$, $x\in(0,1)$,故 $f(x)$ 单增.

$$\|f\|_\infty=\max_{0\leqslant x\leqslant 1}|(x-1)^3|=\max\{|f(0)|,|f(1)|\}=1$$

$$\|f\|_1=\int_0^1|f(x)|\mathrm{d}x=\int_0^1(1-x)^3\mathrm{d}x=\frac{1}{4}$$

$$\|f\|_2=\left[\int_0^1 f^2(x)\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}}=\left[\int_0^1(1-x)^6\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{7}}$$

(2) $\|f\|_\infty = \max\limits_{0\leqslant x\leqslant 1}\left|x-\frac{1}{2}\right| = \max\left\{|f(0)|, \left|f\left(\frac{1}{2}\right)\right|, |f(1)|\right\} = \frac{1}{2}$

$$\|f\|_1 = \int_0^1 |f(x)|\,\mathrm{d}x = \int_0^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}-x\right)\mathrm{d}x + \int_{\frac{1}{2}}^1\left(x-\frac{1}{2}\right)\mathrm{d}x = \frac{1}{4}$$

$$\|f\|_2 = \left[\int_0^1 f^2(x)\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\int_0^1\left(x-\frac{1}{2}\right)^2\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{12}}$$

(3) $f'(x) = x^{m-1}(1-x)^{n-1}[m-(m+n)x], x\in[0,1]$

令 $f'(x)=0$，得驻点 $\frac{m}{m+n}$，$f\left(\frac{m}{m+n}\right) = \left(\frac{m}{m+n}\right)^m\left(\frac{n}{m+n}\right)^n$，于是

$$\|f\|_\infty = \max\left\{f(0), f(1), f\left(\frac{m}{m+n}\right)\right\} = \frac{m^m n^n}{(m+n)^{m+n}}$$

$$\|f\|_1 = \int_0^1 |f(x)|\,\mathrm{d}x = \int_0^1 x^m(1-x)^n\mathrm{d}x = \frac{m!n!}{(m+n+1)!}$$

$$\|f\|_2 = \left[\int_0^1 f^2(x)\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\int_0^1 x^{2m}(1-x)^{2n}\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{(2m)!(2n)!}{(2m+2n+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

(4) $f'(x) = 10(x+1)^9\mathrm{e}^{-x} + (x+1)^{10}(-\mathrm{e}^{-x}) =$

$(x+1)^9\mathrm{e}^{-x}(9-x) > 0$，故 $f(x)$ 在 $[0,1]$ 上单增

$$\|f\|_\infty = \max_{0\leqslant x\leqslant 1}|f(x)| = \max\{|f(0)|, |f(1)|\} = \frac{2^{10}}{\mathrm{e}}$$

$$\|f\|_1 = \int_0^1 |f(x)|\,\mathrm{d}x = \int_0^1 (x+1)^{10}\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x =$$

$$-(x+1)^{10}\mathrm{e}^{-x}\Big|_0^1 + \int_0^1 10(x+1)^9\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x = 5-\frac{\mathrm{e}}{10}$$

$$\|f\|_2 = \left[\int_0^1 (x+1)^{20}\mathrm{e}^{-2x}\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}} = 7\left(\frac{3}{4}-\frac{4}{\mathrm{e}^2}\right)$$

5. 证明 $\|f-g\| \geqslant \|f\| - \|g\|$

证明　$\|f\| = \|f-g+g\| \leqslant \|f-g\| + \|g\|$

所以　$\|f\| - \|g\| \leqslant \|f-g\|$

6. 对 $f(x), g(x) \in \mathbf{C}^1[a,b]$，定义

(1) $(f,g) = \int_a^b f'(x)g'(x)\mathrm{d}x$；

(2) $(f,g) = \int_a^b f'(x)g'(x)\mathrm{d}x + f(a)g(a)$.

问它们是否构成内积.

证明　(1) 取 $f(x) = 1 \neq 0$，$f(x)\in\mathbf{C}^1[a,b]$，由

$$(f, f) = \int_a^b f'(x) f'(x) \mathrm{d}x = 0$$

知正定性条件不满足，也即不构成内积.

(2) 正定性 $\quad (f, f) = \int_a^b [f'(x)]^2 \mathrm{d}x + f^2(a) \geqslant 0$

若$(f, f) = 0$则有$\int_a^b [f'(x)]^2 \mathrm{d}x = 0$和$f(a) = 0$.

$$\int_a^b [f'(x)]^2 \mathrm{d}x = 0 \Rightarrow f'(x) \equiv 0 \Rightarrow \left.\begin{matrix} f(x) \equiv \text{const} \\ f(a) = 0 \end{matrix}\right\} \Rightarrow f(x) \equiv 0$$

正定性得证.

对称性 $\qquad (f, g) = (g, f)$

齐次性 $\qquad (\alpha f, g) = \alpha(f, g)$

是显然成立的(α为实数).

设$f, g, h \in \mathbf{C}^1[a, b]$，则

$$(f+g, h) = \int_a^b [f+g]'h'\mathrm{d}x + [f(a)+g(a)]h(a) =$$

$$\int_a^b f'h'\mathrm{d}x + f(a)h(a) + \int_a^b g'h'\mathrm{d}x + g(a)h(a) =$$

$$(f, h) + (g, h)$$

综合以上4点知定义(2)构成$\mathbf{C}^1[a, b]$上的内积.

7. 令$T_n^*(x) = T_n(2x-1)$，$x \in [0, 1]$，试证$\{T_n^*(x)\}$是在$[0, 1]$上带权$\rho(x) = \dfrac{1}{\sqrt{x-x^2}}$的正交多项式，并求$T_0^*(x)$，$T_1^*(x)$，$T_2^*(x)$，$T_3^*(x)$.

证明 $\quad \int_0^1 T_n^*(x) T_m^*(x) \rho(x) \mathrm{d}x = \int_0^1 T_n(2x-1) T_m(2x-1) \dfrac{1}{\sqrt{x-x^2}} \mathrm{d}x$

$$\xlongequal{\text{令 } t = 2x-1} \int_{-1}^1 T_n(t) T_m(t) \frac{1}{\sqrt{1-t^2}} \mathrm{d}t =$$

$$\begin{cases} 0, & n \neq m \\ \pi, & n = m = 0 \\ \dfrac{\pi}{2}, & n = m \neq 0 \end{cases}$$

故$\{T_n^*(x)\}_{n=0}^{\infty}$是在$[0, 1]$上带权$\rho(x) = \dfrac{1}{\sqrt{x-x^2}}$的正交多项式.

$T_0(x) = 1 \Rightarrow T_0^*(x) = 1$

$T_1(x)=x \Rightarrow T_1^*(x)=2x-1$

$T_2(x)=2x^2-1 \Rightarrow T_2^*(x)=2(2x-1)^2-1=8x^2-8x+1$

$T_3(x)=4x^3-3x \Rightarrow T_3^*(x)=4(2x-1)^3-3(2x-1)=$

$\qquad 32x^3-48x^2+18x-1$

8. 对权函数 $\rho(x)=1+x^2$，区间[－1，1]，试求首项系数为1的正交多项式 $\varphi_n(x)$，$n=0,1,2,3$.

解　在区间[－1,1]上定义内积　$(f,g)=\int_{-1}^{1} f(x)g(x)\rho(x)\mathrm{d}x$

$$\varphi_0(x)=1,\quad \alpha_0=\frac{(x\varphi_0,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=\frac{0}{8/3}=0$$

$$\varphi_1(x)=(x-\alpha_0)\varphi_0=x$$

$$\alpha_1=\frac{(x\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=\frac{0}{16/15}=0,\quad \beta_1=\frac{(\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=\frac{16/15}{8/3}=\frac{2}{5}$$

$$\varphi_2(x)=(x-\alpha_1)\varphi_1-\beta_1\varphi_0=x^2-\frac{2}{5}$$

$$\alpha_2=\frac{(x\varphi_2,\varphi_2)}{(\varphi_2,\varphi_2)}=\frac{0}{136/525}=0,\quad \beta_2=\frac{(\varphi_2,\varphi_2)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=\frac{136/525}{16/15}=\frac{17}{70}$$

$$\varphi_3(x)=(x-\alpha_2)\varphi_2-\beta_2\varphi_1=x^3-\frac{9}{14}x$$

9. 试证明 $u_n(x)=\dfrac{\sin[(n+1)\arccos x]}{\sqrt{1-x^2}}$ 给出的第二类切比雪夫多项式簇 $\{u_n(x)\}_{n=0}^{+\infty}$ 是区间[－1，1]上带权 $\rho(x)=\sqrt{1-x^2}$ 的正交多项式.

证明　$\displaystyle\int_{-1}^{1} u_n(x)u_m(x)\rho(x)\mathrm{d}x \xlongequal{\theta=\arccos x} \int_0^{\pi}\sin(n+1)\theta\sin(m+1)\theta\mathrm{d}\theta$

$$\xlongequal{\text{def}} I(n,m)$$

当 $n=m$ 时，

$$I(n,m)=\int_0^{\pi}\frac{1-\cos 2(n+1)\theta}{2}\mathrm{d}\theta=\frac{\pi}{2}$$

当 $n\neq m$ 时，

$$I(n,m)=\int_0^{\pi}\sin(n+1)\theta\mathrm{d}\frac{-\cos(m+1)\theta}{m+1}=\left[-\frac{\cos(m+1)\theta}{m+1}\sin(n+1)\theta\right]_0^{\pi}+$$

$$\int_0^{\pi}\frac{n+1}{m+1}\cos(n+1)\theta\cos(m+1)\theta\mathrm{d}\theta=$$

$$\frac{n+1}{m+1}\int_0^{\pi}\cos(n+1)\theta\mathrm{d}\frac{\sin(m+1)\theta}{m+1}=$$

$$\left[\frac{n+1}{(m+1)^2}\cos(n+1)\theta\sin(n+1)\theta\right]_0^{\pi}+$$

$$\left(\frac{n+1}{m+1}\right)^2\int_0^{\pi}\sin(n+1)\theta\sin(m+1)\theta\mathrm{d}\theta=\left(\frac{n+1}{m+1}\right)^2 I(n,m)$$

于是 $I(n,m)\left[1-\left(\frac{n+1}{m+1}\right)^2\right]=0$，进而 $I(n,m)=0$. 正交性得证.

10. 证明切比雪夫多项式 $T_n(x)$ 满足微分方程

$$(1-x^2)T_n''(x)-xT_n'(x)+n^2T_n(x)=0$$

证明 切比雪夫多项式为 $T_n(x)=\cos(n\arccos x)$，$|x|\leqslant 1$

$$T_n'(x)=\sin(n\arccos x)\frac{n}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$T_n''(x)=\cos(n\arccos x)\frac{-n^2}{1-x^2}-\sin(n\arccos x)$$

$$\frac{nx}{(1-x^2)^{3/2}}=$$

$$-\frac{n^2}{1-x^2}T_n(x)+\frac{x}{1-x^2}xT_n'(x)$$

两边同乘以 $1-x^2$，并移项得

$$(1-x^2)T_n''(x)-xT_n'(x)+n^2T_n(x)=0$$

11. 假设 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续，求 $f(x)$ 的零次最佳一致逼近多项式.

解 由闭区间连续函数性质知，存在 $x_1,x_2\in[a,b]$，使得 $\max\limits_{x\in[a,b]}f(x)=f(x_1)$ 和 $\min\limits_{x\in[a,b]}f(x)=f(x_2)$ 成立.

取 $P=\frac{1}{2}[f(x_1)+f(x_2)]$，则有

$$\max_{a\leqslant x\leqslant b}|f(x)-P|=\max\{|f(x_1)-P|,|f(x_2)-P|\}$$

而由

$$f(x_1)-P=-(f(x_2)-P)=\frac{f(x_1)-f(x_2)}{2}$$

知
$$\|f-P\|_\infty=\frac{f(x_1)-f(x_2)}{2}$$

进而有 x_1 和 x_2 是 P 逼近 $f(x)$ 的两个交错的偏差点. 由切比雪夫定理知 P 就是 $f(x)$ 的零次最佳一致逼近多项式.

12. 选取常数 a，使 $\max\limits_{0\leqslant x\leqslant 1}|x^3-ax|$ 达到极小，又问这个解是否唯一？

解 x^3-ax 是 $[-1,1]$ 上的奇函数，故

$$\max_{0\le x\le 1}|x^3-ax|=\max_{-1\le x\le 1}|x^3-ax|=\|(x^3-ax)-0\|_\infty$$

要使上式达到极小，即求 0 在[-1，1]上的三次最佳一致逼近多项式．由切比雪夫多项式的性质知

$$x^3-ax=\tilde{T}_3(x)=\frac{1}{4}(4x^3-3x)$$

时 $\|x^3-ax-0\|_\infty$ 达到最小，故 $a=\frac{3}{4}$.

由最佳一致逼近多项式的唯一性知 a 也是唯一的．

13. 求 $f(x)=\sin x$ 在 $\left[0,\frac{\pi}{2}\right]$ 上的最佳一次逼近多项式，并估计误差．

解　二次导函数 $f''(x)=(\sin x)''=-\sin x$ 当 $x\in[0,\frac{\pi}{2}]$ 时不变号，故 $f(x)$ 的最佳一次逼近多项式为

$$P_1(x)=\frac{f(0)+f(x_2)}{2}+\frac{f\left(\frac{\pi}{2}\right)-f(0)}{\frac{\pi}{2}-0}\left(x-\frac{0+x_2}{2}\right)=$$

$$\frac{1}{2}f(x_2)+\frac{2}{\pi}\left(x-\frac{1}{2}x_2\right)$$

由 $f'(x_2)=\dfrac{f\left(\frac{\pi}{2}\right)-f(0)}{\frac{\pi}{2}-0}=\dfrac{2}{\pi}$，即 $\cos x_2=\dfrac{2}{\pi}$，求得

$$x_2=\arccos\frac{2}{\pi}\approx 0.880\ 69,\quad f(x_2)=\sin\left(\arccos\frac{2}{\pi}\right)\approx 0.771\ 18$$

将以上数据代入 $P_1(x)$ 得

$$P_1(x)=\frac{2}{\pi}x+0.105\ 26$$

误差为

$$\|\sin x-P_1(x)\|_\infty=|\sin 0-P_1(0)|=0.105\ 26$$

14. 求 $f(x)=e^x$ 在[0，1]上的最佳一次逼近多项式．

解　$f''(x)=e^x$ 在[0，1]上不变号，它的最佳一次逼近多项式

$$P_1(x)=\frac{f(0)+f(x_2)}{2}+\frac{f(1)-f(0)}{1-0}\left(x-\frac{0+x_2}{2}\right)=$$

$$\frac{1}{2}[1+f(x_2)]+(e-1)\left(x-\frac{1}{2}x_2\right)$$

x_2 满足方程
$$f'(x_2) = \frac{f(1)-f(0)}{1-0}$$
即
$$e^{x_2} = e-1$$
解之得 $x_2 = \ln(e-1)$，$f(x_2) = e^{x_2} = e-1$. 故有
$$P_1(x) = \frac{e}{2} + (e-1)\left[x - \frac{1}{2}\ln(e-1)\right] =$$
$$(e-1)x + \frac{1}{2}[e-(e-1)\ln(e-1)]$$

15. 求 $f(x) = x^4 + 3x^3 - 1$ 在区间 $[0, 1]$ 上的三次最佳一致逼近多项式.

解 令 $t = 2\left(x - \frac{1}{2}\right)$，则 $t \in [-1,1]$
$$f(x) = \left(\frac{t+1}{2}\right)^4 + 3\left(\frac{t+1}{2}\right)^3 - 1 =$$
$$\frac{1}{16}[t^4 + 10t^3 + 24t^2 + 22t - 9] \xlongequal{\text{def}} g(t)$$

$16g(t)$ 是首项系数为 1 的四次多项式，记它的三次最佳一致逼近多项式为 $P_3(t)$，这样
$$\| 16g(t) - P_3(t) \|_\infty = \| [16g(t) - P_3(t)] - 0 \|_\infty$$
达到了最小. 利用切比雪夫多项式的性质知
$$16g(t) - P_3(t) = \tilde{T}_4(t) = \frac{1}{8}[8t^4 - 8t^2 + 1]$$
$$P_3(t) = 16g(t) - \tilde{T}_4(t) = 10t^3 + 25t^2 + 22t - \frac{73}{8}$$

$g(t)$ 的最佳一致逼近多项式为 $\frac{1}{16}P_3(t)$，进而 $f(x)$ 的最佳一致逼近多项式为
$$\frac{1}{16}P_3(2x-1) = \frac{1}{16}\left[10(2x-1)^3 + 25(2x-1)^2 + 22(2x-1) - \frac{73}{8}\right] =$$
$$5x^3 - \frac{5}{4}x^2 + \frac{1}{4}x - \frac{129}{128}$$

16. $f(x) = |x|$，在 $[-1, 1]$ 上求关于 $\Phi = \text{span}\{1, x^2, x^4\}$ 的最佳平方逼近多项式.

解 内积 $(f, g) = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)\mathrm{d}x$. 记 $\varphi_0 = 1$，$\varphi_1 = x^2$，$\varphi_2 = x^4$. 则
$$(\varphi_0, \varphi_0) = 2, \quad (\varphi_0, \varphi_1) = \frac{2}{3}, \quad (\varphi_0, \varphi_2) = \frac{2}{5}$$

$$(\varphi_0, \varphi_1) = \frac{2}{5}, \quad (\varphi_1, \varphi_2) = \frac{2}{7}, \quad (\varphi_2, \varphi_2) = \frac{2}{9}$$

$$(f, \varphi_0) = 1, \quad (f, \varphi_1) = \frac{1}{2}, \quad (f, \varphi_2) = \frac{1}{3}$$

求解法方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & \frac{2}{3} & \frac{2}{5} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{5} & \frac{2}{7} \\ \frac{2}{5} & \frac{2}{7} & \frac{2}{9} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

得 $a_0 = \frac{15}{128} \approx 0.117\ 187\ 5$，$a_1 = \frac{105}{64} \approx 1.640\ 625$，$a_2 = -\frac{105}{128} \approx -0.820\ 312\ 5$.

故 $f(x)$ 的最佳平方逼近多项式为

$a_0\varphi_0 + a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 = 0.117\ 187\ 5 + 1.640\ 625\ x^2 - 0.820\ 312\ 5x^4$

17. 求函数 $f(x)$ 在指定区间上关于 $\Phi = \mathrm{span}\{1, x\}$ 的最佳平方逼近多项式：

(1) $f(x) = \frac{1}{x}$，$x \in [1, 3]$；　(2) $f(x) = e^x, x \in [0,1]$；

(3) $f(x) = \cos\pi x$，$x \in [0, 1]$；　(4) $f(x) = \ln x, x \in [1,2]$.

解　(1) 内积 $(f, g) = \int_1^3 f(x)g(x)\mathrm{d}x$. 则

$$(1,1) = 2, \quad (1,x) = 4, \quad (x, x) = \frac{26}{3}$$

$$(f, 1) = \ln 3, \quad (f, x) = 2$$

解法方程组 $\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 4 & \frac{26}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ln 3 \\ 2 \end{bmatrix}$，得

$$a_0 = \frac{13}{2}\ln 3 - 6 \approx 1.141\ 0, \quad a_1 = 3 - 3\ln 3 \approx -0.295\ 8$$

这样求得 $f(x)$ 的最佳平方逼近多项式为

$$\varphi(x) = a_0 \times 1 + a_1 \times x = 1.141\ 0 - 0.295\ 8x$$

(2) 内积 $(f,g) = \int_0^1 f(x)g(x)\mathrm{d}x$，则

$\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x$,故有

$$\|\varphi_0\|_2^2=1,\ \|\varphi_1\|_2^2=\frac{1}{3},(\varphi_0,\varphi_1)=\frac{1}{2}$$

$$(f,\varphi_0)=\mathrm{e}-1,(f,\varphi_1)=1$$

解法方程组
$$\begin{bmatrix}1 & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathrm{e}-1\\ 1\end{bmatrix}$$

$$a_0=0.187\ 8,\quad a_1=1.624\ 4$$

故求得 $f(x)$ 的最佳平方逼近多项式为

$$\varphi(x)=a_0+a_1x=0.187\ 8+1.624\ 4x$$

(3) 对 $f(x)=\cos\pi x,\ x\in[0,1]$ 作线性变换 $x=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}t$,即

$$f(x)=\cos\pi x=\cos\left(\frac{t+1}{2}\pi\right)\overset{\text{def}}{=\!=}g(t),\quad t\in[-1,1]$$

利用勒让德正交多项式 $p_0(t)=1,\ p_1(t)=t$ 为基建立 $g(t)$ 的一次最佳平方逼近多项式

$$\varphi(t)=\frac{(g,p_0)}{(p_0,p_0)}p_0(t)+\frac{(g,p_1)}{(p_1,p_1)}p_1(t)=$$

$$\frac{0}{2}p_0(t)+\frac{-8/\pi^2}{2/3}p_1(t)=-\frac{12}{\pi^2}t$$

$f(x)$ 的最佳平方逼近为

$$\varphi(2x-1)=-\frac{12}{\pi^2}(2x-1)\approx-2.431\ 7x+1.215\ 9$$

(4) 内积 $(f,g)=\int_1^2 f(x)g(x)\mathrm{d}x$,则 $\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x$,故有

$$\|\varphi_0\|_2^2=1,\ \|\varphi_1\|_2^2=\frac{7}{3},(\varphi_0,\varphi_1)=\frac{3}{2}$$

$$(f,\varphi_0)=2\ln2-1,(f,\varphi_1)=2\ln2-\frac{3}{4}$$

解法方程组
$$\begin{bmatrix}1 & \frac{3}{2}\\ \frac{3}{2} & \frac{7}{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\ln2-1\\ 2\ln2-\frac{3}{4}\end{bmatrix}$$

$$a_0=-0.637\ 1,\quad a_1=0.682\ 2$$

故求得 $f(x)$ 的最佳平方逼近多项式为

$$\varphi(x)=a_0+a_1x=0.682\,2x-0.637\,1$$

18. $f(x)=\sin\frac{\pi}{2}x$，在$[-1,1]$上按勒让德多项式展开求三次最佳平方逼近多项式．

解　记$\{p_n\}_{n=0}^{\infty}$为勒让德正交多项式

$$(p_n,p_n)=\int_{-1}^{1}p_n^2(x)\mathrm{d}x=\frac{2}{2n+1},\quad n=0,1,2,\cdots$$

$$(p_0,f)=0,\quad (p_1,f)=\frac{8}{\pi^2},\quad (p_2,f)=0$$

$$(p_3,f)=\frac{48(\pi^2-10)}{\pi^4}$$

$f(x)$的三次最佳平方逼近多项式为

$$\sum_{j=0}^{3}\frac{(p_j,f)}{(p_j,p_j)}p_j=0+\frac{12}{\pi^2}p_1(x)+0+\frac{168(\pi^2-10)}{\pi^4}p_3(x)=$$

$$\frac{120(21-2\pi^2)}{\pi^4}x+\frac{420(\pi^2-10)}{\pi^4}x^3\approx$$

$$1.553\,2x-0.562\,2x^3$$

19. 观测物体的直线运动，得出以下数据：

时间 t/s	0	0.9	1.9	3.0	3.9	5.0
距离 s/m	0	10	30	50	80	110

求运动方程．

解　经描图发现t和s近似服从线性规律．故作线性模型$s=a+bt$，令$\Phi=\mathrm{span}\{1,t\}$．计算离散内积有

$$(1,1)=\sum_{j=0}^{5}1^2=6,\quad (1,t)=\sum_{j=0}^{5}t_j=14.7$$

$$(t,t)=\sum_{j=0}^{5}t_j^2=53.63$$

$$(1,s)=\sum_{j=0}^{5}s_j=280,\quad (t,s)=\sum_{j=0}^{5}t_js_j=1\,078$$

求解法方程组得

$$\begin{bmatrix}6 & 14.7\\ 14.7 & 53.63\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}280\\ 1\,078\end{bmatrix}$$

$$a=-7.855\,048,\quad b=22.253\,76$$

运动方程为 $s = -7.855\ 048 + 22.253\ 76t$

平方误差 $\delta^2 = \sum_{j=0}^{7}[s_j - s(t_j)]^2 \approx 2.1 \times 10^2$

20. 已知实验数据如下：

x_i	19	25	31	38	44
y_i	19.0	32.3	49.0	73.3	97.8

用最小二乘法求形如 $y \approx a + bx^2$ 的经验公式，并计算均方误差．

解 $\Phi = \mathrm{span}\{1, x^2\}$，计算离散内积

$$(1, 1) = \sum_{j=0}^{4} 1^2 = 5, \quad (1, x^2) = \sum_{j=0}^{4} x_j^2 = 5\ 327$$

$$(x^2, x^2) = \sum_{j=0}^{4} x_j^4 = 7\ 277\ 699$$

$$(1, y) = \sum_{j=0}^{4} y_j = 271.4, \quad (x^2, y) = \sum_{j=0}^{4} x_j^2 y_j = 369\ 321.5$$

解法方程组

$$\begin{bmatrix} 5 & 5\ 327 \\ 5\ 327 & 7\ 277\ 699 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 271.4 \\ 369\ 321.5 \end{bmatrix}$$

得

$$a \approx 0.972\ 579, \quad b = 0.050\ 035$$

均方误差 $\delta = \left\{ \sum_{j=0}^{4} [y(x_j) - y_j]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \approx 0.122\ 6$

21. 在某化学反应中，由实验得分解物浓度与时间关系如下：

时间 t	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55
浓度 y ($\times 10^{-4}$)	0	1.27	2.16	2.86	3.44	3.87	4.15	4.37	4.51	4.58	4.62	4.64

用最小二乘法求 $y = f(t)$.

解 观察所给数据特点，建立拟合模型 $y = ae^{-\frac{b}{t}}$ $(a, b > 0)$. 该模型关于参数非线性，两边取对数得

$$\ln y = \ln a - \frac{1}{t} b, \quad \text{记 } \ln a = A$$

$\Phi = \mathrm{span}\left\{1, -\frac{1}{t}\right\}$，由于 $t = 0$ 时条件自然满足，内积 $(f, g) =$

$\sum_{j=1}^{11} f(t_j)g(t_j)$. 经计算有

$$(1,1)=11,\quad \left(1,-\frac{1}{t}\right)=-0.603\,975$$

$$\left(-\frac{1}{t},-\frac{1}{t}\right)=0.062\,321,\quad (1,\ln y)=-87.674\,095$$

$$\left(-\frac{1}{t},\ln y\right)=5.032\,489$$

解法方程组

$$\begin{bmatrix} 11 & -0.603\,975 \\ -0.603\,975 & 0.062\,321 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A \\ b \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -87.674\,095 \\ 5.032\,489 \end{bmatrix}$$

得　$A=-7.558\,781$，$b=7.496\,163$，$a=e^A=5.215\,103\times 10^{-4}$

得到拟合模型

$$y=5.215\,103e^{\frac{7.496\,163}{t}}\times 10^{-4}$$

拟合平方误差

$$\delta^2=\sum_{j=1}^{11}[y(t_j)-y_j]^2=3.376\,9\times 10^{-8}$$

22. 给出一张记录$\{f_k\}=(4,3,2,1,0,1,2,3)$，用 FFT 算法求$\{f_k\}$的离散谱$\{c_k\}$.

解　$w=e^{-i\frac{2\pi}{8}}=e^{-i\frac{\pi}{4}}$，$w^2=-i$，$w^3=e^{-i\frac{3\pi}{4}}$

计算过程如下：

k	0	1	2	3	4	5	6	7
$x_k=A_0(k)$	4	3	2	1	0	1	2	3
A_1	4	4	4	$2w$	4	0	4	$-2w^3$
A_2	8	4	0	4	8	$2\sqrt{2}$	0	$-2\sqrt{2}$
$8c_j=A_3(j)$	16	$4+2\sqrt{2}$	0	$4-2\sqrt{2}$	0	$4-2\sqrt{2}$	0	$4+2\sqrt{2}$

$\{f_k\}$的离散谱$\{c_k\}$是$\left(2,\frac{2+\sqrt{2}}{4},0,\frac{2-\sqrt{2}}{4},0,\frac{2-\sqrt{2}}{4},0,\frac{2+\sqrt{2}}{4}\right)$.

23. 用辗转相除法将$R_{22}(x)=\dfrac{3x^2+6x}{x^2+6x+6}$化为连分式.

解

$$R_{22}(x)=\frac{3x^2+6x}{x^2+6x+6}=3-\frac{12x+18}{x^2+6x+6}=3-\cfrac{12}{x+4.5-\cfrac{0.75}{x+1.5}}$$

24. 求 $f(x)=\sin x$ 在 $x=0$ 处的(3,3)阶帕德逼近 $R_{33}(x)$.

解 设 $R_{33}(x)=\dfrac{a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3}{1+b_1x+b_2x^2+b_3x^3}$

由 $f(x)=\sin x=x-\dfrac{x^3}{3!}+\dfrac{x^5}{5!}-\dfrac{x^7}{7!}+\cdots$,得

$$c_0=0,\ c_1=1,\ c_2=0,\ c_3=-\frac{1}{6},\ c_4=0,\ c_5=\frac{1}{120},\ c_6=0$$

$\{b_j\}_{j=1}^{3}$ 是下列方程组的解

$$-\begin{bmatrix}c_1 & c_2 & c_3\\ c_2 & c_3 & c_4\\ c_3 & c_4 & c_5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}b_3\\ b_2\\ b_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}c_4\\ c_5\\ c_6\end{bmatrix}$$

即
$$-\begin{bmatrix}1 & 0 & -\frac{1}{6}\\ 0 & -\frac{1}{6} & 0\\ -\frac{1}{6} & 0 & \frac{1}{120}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}b_3\\ b_2\\ b_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ \frac{1}{120}\\ 0\end{bmatrix}$$

解得
$$b_3=b_1=0,\quad b_2=\frac{1}{20}$$

确定 $\{a_j\}_{j=0}^{3}$

$$a_0=c_0=0,\quad a_1=c_0b_1+c_1=1$$

$$a_2=c_0b_2+c_1b_1+c_2=0,\quad a_3=c_0b_3+c_1b_2+c_2b_3+c_3=-\frac{7}{60}$$

故有

$$R_{33}(x)=\frac{a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3}{1+b_1x+b_2x^2+b_3x^3}=\frac{x-\frac{7}{60}x^3}{1+\frac{1}{20}x^2}=\frac{60x-7x^3}{60+3x^2}$$

25. 求 $f(x)=e^x$ 在 $x=0$ 处的(2,1)阶帕德逼近 $R_{21}(x)$.

解 设 $R_{21}(x)=\dfrac{a_0+a_1x+a_2x^2}{1+b_1x}$,由 $f(x)=e^x$ 的 Taylor 公式

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\cdots$$

知
$$c_0 = 1,\quad c_1 = 1,\quad c_2 = \frac{1}{2},\quad c_3 = \frac{1}{6}$$

由 $c_3 = -c_2 b_1$，得 $b_1 = -\frac{1}{3}$.

$$a_0 = c_0 = 1,\quad a_1 = c_0 b_1 + c_1 = \frac{2}{3}$$

$$a_2 = c_0 b_2 + c_1 b_1 + c_2 = \frac{1}{6}$$

故

$$R_{21}(x) = \frac{a_0 + a_1 x + a_2 x^2}{1 + b_1 x} = \frac{1 + \frac{2}{3}x + \frac{1}{6}x^2}{1 - \frac{1}{3}x} = \frac{6 + 4x + x^2}{6 - 2x}$$

第4章 数值积分与数值微分

1.1 重点、难点全析

1.1.1 数值求积公式

1. 数值求积的基本思想

积分 $I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$ 的数值求积公式可表示为

$$I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.1}$$

数值求积公式(4.1)的余项为

$$R(f)=I(f)-\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.2}$$

式中 x_k 称为求积节点，A_k 称为求积系数，亦称伴随节点 x_k 的权. A_k 仅与节点 x_k 的选取有关，而不依赖于被积函数 $f(x)$ 的具体形式.

2. 插值型求积公式

当 $f(x)$ 用 Lagrange 插值多项式 $L_n(x)$ 近似时，构造出的求积公式

$$I_n=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.3}$$

称为是插值型的. 式中求积系数 A_k 通过插值基函数 $l_k(x)$ 积分得出，即

$$A_k=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\int_a^b \frac{w_{n+1}(x)}{(x-x_k)w_{n+1}'(x_k)}\mathrm{d}x,\quad k=0,1,\cdots,n \tag{4.4}$$

式中 $w_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$.

对于插值型求积公式(4.3)，其余项

$$R(f)=I-I_n=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)\mathrm{d}x \tag{4.5}$$

式中 ξ 与变量 x 有关.

3. 求积公式的稳定性

定理4.1　若求积公式(4.1)中系数 $A_k>0(k=0,1,\cdots,n)$，则此求积公式是稳定的.

4. 求积公式的代数精度

求积公式(4.1)若对于次数不超过 m 次的多项式均能准确成立，但对于 $m+1$ 次的多项式就不能准确成立，则称该求积公式具有 m 次代数精度.

定理4.2　形如式(4.3)的求积公式至少有 n 次代数精度的充要条件是它是插值型的.

4.1.2　牛顿-柯特斯公式

1. 基本公式

设将积分区间$[a,b]$划为 n 等分，步长 $h=\dfrac{b-a}{n}$ 选取等距节点 $x_k=a+kh(k=0,1,\cdots,n,)$ 则可构造出牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式

$$I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k) \tag{4.6}$$

式中 $C_k^{(n)}$ 称为柯特斯系数.

$n=1$ 时，求积公式为梯形公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\frac{(b-a)}{2}[f(a)+f(b)] \tag{4.7}$$

$n=2$ 时，求积公式为辛普森公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\frac{(b-a)}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \tag{4.8}$$

$n=4$ 时，求积公式为柯特斯公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)] \tag{4.9}$$

式中，$x_k=a+kh$，$h=\dfrac{b-a}{4}$，$k=0,1,2,3,4$.

当 $n\geqslant8$ 时，柯特斯系数 $C_k^{(n)}$ 出现负值，此时计算不稳定，故 $n\geqslant8$ 时的牛顿-柯特斯公式是不使用的.

2. 代数精度

定理4.3　当 n 为奇数时，牛顿-柯特斯公式(4.6)至少有 n 次代数精度；当

n 为偶数时，则至少有 $n+1$ 次代数精度．

3．几种低阶求积公式的余项

梯形公式：

$$R_T = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3, \quad \eta \in (a, b) \tag{4.10}$$

辛普森公式：

$$R_S = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a, b) \tag{4.11}$$

柯特斯公式：

$$R_C = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta), \quad \eta \in (a, b) \tag{4.12}$$

1.1.3 复化求积公式

把积分区间 $[a,b]$ 分成 n 等分，在每个子区间上应用低阶求积公式的方法称为复化求积方法．

复化梯形公式 $\left(h = \frac{b-a}{n}\right)$：

$$I \approx T_n = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \tag{4.13}$$

其余项为

$$R_n(f) = -\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\eta), \quad \eta \in (a, b) \tag{4.14}$$

复化辛普森公式 $\left(h = \frac{b-a}{n}\right)$：

$$I \approx S_n = \frac{h}{6}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \tag{4.15}$$

其余项为

$$R_n(f) = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a, b) \tag{4.16}$$

1.1.4 龙贝格求积公式

龙贝格求积算法的计算步骤可用下表表示，其详细过程见教材．

k	区间等分数 $n=2^k$	梯形序列 T_{2^k}	辛浦生序列 $S_{2^{k-1}}$	柯特斯序列 $C_{2^{k-2}}$	龙贝格序列 $R_{2^{k-3}}$
0	$2^0=1$	T_1			
1	$2^1=2$	T_2	S_1		
2	$2^2=4$	T_4	S_2	C_1	
3	$2^3=8$	T_8	S_4	C_2	R_1
4	$2^4=16$	T_{16}	S_8	C_4	R_2
5	$2^5=32$	T_{32}	S_{16}	C_8	R_4
…	…	…	…	…	…

4.1.5　高斯求积公式

1. 一般理论

定义 4.1　$[a,b]$上带权$\rho(x)$的积分$I=\int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x$，它的求积公式为

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.17}$$

若求积公式(4.17)具有$2n+1$次代数精度，则称其节点$x_k(k=0,1,\cdots,n)$为高斯点，相应的公式(4.17)称为高斯求积公式．

定理 4.4　插值型求积公式(4.17)的节点$a\leqslant x_0<x_1<\cdots<x_n\leqslant b$是高斯点的充要条件是，以这些节点为零点的多项式

$$w_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

与任何次数不超过n的多项式$P(x)$带权$\rho(x)$正交，即

$$\int_a^b P(x)w_{n+1}(x)\rho(x)\mathrm{d}x=0 \tag{4.18}$$

根据定理4.4，在$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式的零点即为高斯求积公式的节点，其系数

$$A_k=\int_a^b \rho(x)\frac{w_{n+1}^2(x)}{(x-x_k)^2 w'^2_{n+1}(x_k)}\mathrm{d}x \tag{4.19}$$

其余项为

$$R_n(f)=\frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b w_{n+1}^2(x)\rho(x)\mathrm{d}x,\quad \eta\in(a,b) \tag{4.20}$$

定理 4.5 高斯求积公式(4.17)的求积系数 $A_k(k=0,1,\cdots,n)$ 全是正的，故高斯求积公式是稳定的.

定理 4.6 若 $f(x)\in C[a,b]$，则高斯求积公式(4.17)是收敛的，即

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)=\int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x \tag{4.21}$$

常用的高斯型求积公式有：高斯-勒让德求积公式、高斯-切比雪夫求积公式、高斯-拉盖尔求积公式及高斯-埃尔米特求积公式等，可参考教材.

1.1.6 数值微分

数值求导数常用泰勒展开法、插值函数法、数值积分法和三次样条法等，也可使用理查森外推法. 考虑到舍入误差的因素，数值微分公式中的步长一般不宜取得过小. 具体求导公式可参考教材.

1.2 习题全解

1. 确定下列求积公式中的待定参数，使其代数精确度尽量高，并指明所构造出的求积公式所具有的代数精度.

(1) $\int_{-h}^{h}f(x)\mathrm{d}x\approx A_{-1}f(-h)+A_0f(0)+A_1f(h)$；

(2) $\int_{-2h}^{2h}f(x)\mathrm{d}x\approx A_{-1}f(-h)+A_0f(0)+A_1f(h)$；

(3) $\int_{-1}^{1}f(x)\mathrm{d}x\approx \dfrac{f(-1)+2f(x_1)+3f(x_2)}{3}$；

(4) $\int_0^h f(x)\mathrm{d}x\approx \dfrac{h[f(0)+f(h)]}{2}+ah^2[f'(0)-f'(h)]$.

解 (1) 将 $f(x)=1,x,x^2$ 分别代入公式两端并令其左右相等，得

$$\begin{cases}A_{-1}+A_0+A_1=2h\\ -hA_{-1}+hA_1=0\\ h^2A_{-1}+h^2A_1=\dfrac{2}{3}h^3\end{cases}$$

解得 $A_{-1}=A_1=\dfrac{h}{3}$，$A_0=\dfrac{4h}{3}$. 所求公式至少具有 2 次代数精确度. 又由于

$$\int_{-h}^{h}x^3\mathrm{d}x=\frac{h}{3}(-h)^3+\frac{h}{3}\cdot h^3$$

$$\int_{-h}^{h} x^4 \mathrm{d}x \neq \frac{h}{3}(-h)^4 + \frac{h}{3} \cdot h^4$$

故 $\int_{-h}^{h} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{3}f(-h) + \frac{4}{3}hf(0) + \frac{h}{3}f(h)$ 具有 3 次代数精确度．

(2) 令 $f(x) = 1, x, x^2$，代入公式两端令其左右相等，得

$$\begin{cases} A_{-1} + A_0 + A_1 = 4h \\ A_{-1}(-h) + A_1 h = 0 \Rightarrow -A_{-1}h + A_1 = 0 \\ A_{-1}(-h)^2 + A_1 h^2 = \frac{2}{3}(2h)^3 \Rightarrow A_{-1} + A_1 = \frac{16}{3}h \end{cases}$$

解得　$A_{-1} = A_1 = \frac{8}{3}h$、$A_0 = -\frac{4}{3}h$

令 $f(x) = x^3$，得

$$0 = \int_{-2h}^{2h} x^3 \mathrm{d}x = \frac{8}{3}h[(-h)^3 + h^3] = 0$$

令 $f(x) = x^4$，得

$$\frac{64}{5}h^5 = \int_{-2h}^{2h} x^4 \mathrm{d}x \neq \frac{8}{3}h[(-h)^4 + h^4] = \frac{16}{3}h^5$$

故求积公式具有 3 次代数精度.

(3) 当 $f(x) = 1$ 时，易知有

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{3}[f(-1) + 2f(x_1) + 3f(x_2)]$$

令求积公式对 $f(x) = x$、x^2 准确成立，即

$$\begin{cases} -1 + 2x_1 + 3x_2 = 0 \\ 1 + 2x_1^2 + 3x_2^2 = 2 \end{cases}$$

则可解得

$$\begin{cases} x_1 = -0.289\ 9 \\ x_2 = 0.526\ 6 \end{cases} \quad 或 \quad \begin{cases} x_1 = 0.689\ 9 \\ x_2 = -0.126\ 6 \end{cases}$$

将 $f(x) = x^3$ 代入已确定的求积公式，则

$$\int_{-1}^{1} x^3 \mathrm{d}x \neq \frac{1}{3}[f(-1) + 2f(x_1) + 3f(x_2)]$$

故求积公式具有 2 次代数精确度，所求节点为 $x_1 = -0.289\ 9$，$x_2 = 0.526\ 6$ 或 $x_1 = 0.689\ 9$，$x_2 = -0.126\ 6$.

(4) 求积公式只含有一个待定参数 a. 当 $f(x) = 1$，x 时，有

$$\int_0^h 1\mathrm{d}x = \frac{h}{2}[1 + 1] + ah^2[0 - 0]，\quad \int_0^h 1\mathrm{d}x = \frac{h}{2}[1 + 1] + 0$$

$$\int_0^h x\mathrm{d}x = \frac{h}{2}[0+h] + \alpha h^2[1-1]$$

故令 $f(x)=x^2$ 时求积公式准确成立，即

$$\int_0^h x^2\mathrm{d}x = \frac{h}{2}[0+h^2] + \alpha h^2[2\times 0-2h]$$

解得
$$\alpha = \frac{1}{12}$$

将 $f(x)=x^3$，x^4 代入上述确定的求积公式，有

$$\int_0^h x^3\mathrm{d}x = \frac{h}{2}[0+h^3] + \frac{h^2}{12}[0-3h^2]$$

$$\int_0^h x^4\mathrm{d}x \neq \frac{h}{2}[0+h^4] + \frac{h^2}{12}[0-4h^3]$$

故所求求积公式具有 3 次代数精确度.

2. 分别用梯形公式和辛普森公式计算下列积分.

(1) $\int_0^1 \frac{x}{4+x^2}\mathrm{d}x$，$n=8$；　　(2) $\int_0^1 \frac{(1-\mathrm{e}^{-x})^{\frac{1}{2}}}{x}\mathrm{d}x$，$n=10$；

(3) $\int_1^9 \sqrt{x}\mathrm{d}x$，$n=4$；　　(4) $\int_0^{\frac{\pi}{6}} \sqrt{4-\sin^2\varphi}\,\mathrm{d}\varphi$，$n=6$.

解 (1) 复化梯形公式 $n=8, a=0, b=1, f(x)=\frac{x}{4+x^2}, h=\frac{1}{8}$

$$T_8 = \frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{7}f(x_k)+f(b)\right] = 0.111\ 40$$

复化辛普森公式，$h=\frac{1}{8}$

$$S_8 = \frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{7}f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{7}f(x_k)+f(b)\right] = 0.111\ 57$$

(2) $n=10, a=0, b=1, h=\frac{1}{10}, f(x)=\frac{(1-\mathrm{e}^{-x})^{\frac{1}{2}}}{x}$

复化梯形公式为

$$T_{10} = \frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{k=1}^{9}f(x_k)+f(b)] = 1.391\ 48$$

复化辛普森公式为

$$S_{10} = \frac{h}{6}[f(a)+4\sum_{k=0}^{9}f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{9}f(x_k)+f(b)] = 1.454\ 71$$

(3) $n=4, a=1, b=9, h=2, f(x)=\sqrt{x}$

复化梯形公式为

$$T_4 = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{3} f(x_k) + f(b)] = 17.227\,74$$

复化辛普森公式为

$$S_4 = \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=0}^{3} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{3} f(x_k) + f(b)] = 17.322\,2$$

(4) $n = 6, a = 0, b = \frac{\pi}{6}, h = \frac{\pi}{36}, f(x) = \sqrt{4-\sin^2 x}$

复化梯形公式为

$$T_6 = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{5} f(x_k) + f(b)] = 1.035\,62$$

复化辛普森公式为

$$S_6 = \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=0}^{5} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{5} f(x_k) + f(b)] = 1.035\,77$$

3. **直接验证柯特斯公式(4.9)具有 5 次代数精确度．**

证明　柯特斯公式为

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \frac{b-a}{90}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$

令 $f(x) = 1$，则

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = b-a$$

$$\frac{b-a}{90}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] = b-a$$

令 $f(x) = x$，则

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b x\mathrm{d}x = \frac{1}{2}(b^2-a^2)$$

$$\frac{b-a}{90}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] = \frac{1}{2}(b^2-a^2)$$

令 $f(x) = x^2$，得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b x^2\mathrm{d}x = \frac{1}{3}(b^3-a^3)$$

$$\frac{b-a}{90}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] = \frac{1}{3}(b^3-a^3)$$

令 $f(x) = x^3$，则

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b x^2\mathrm{d}x = \frac{1}{4}(b^4-a^4)$$

$$\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]=\frac{1}{4}(b^4-a^4)$$

令 $f(x)=x^4$，则

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\int_a^b x^4\mathrm{d}x=\frac{1}{5}(b^5-a^5)$$

$$\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]=\frac{1}{5}(b^5-a^5)$$

令 $f(x)=x^5$，则

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\int_a^b x^5\mathrm{d}x=\frac{1}{6}(b^6-a^6)$$

$$\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]=\frac{1}{6}(b^6-a^6)$$

令 $f(x)=x^6$，则

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\neq\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$$

因此，该柯特斯公式具有 5 次代数精度.

4. 用辛普森公式求积分 $\int_0^1 e^{-x}\mathrm{d}x$ 并估计误差.

解 $S=\frac{1-0}{6}[e^0+4e^{-\frac{1}{2}}+e^{-1}]=0.632\ 33$

误差

$$|R(f)|=\left|-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)\right|\leqslant$$

$$\frac{1}{180}\times\frac{1}{2^4}\times e^0=0.000\ 35,\quad \eta\in(0,1)$$

5. 推导下列三种矩形求积公式.

(1) $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=(b-a)f(a)+\frac{f'(\eta)}{2}(b-a)^2$;

(2) $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=(b-a)f(b)-\frac{f'(\eta)}{2}(b-a)^2$;

(3) $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)+\frac{f''(\eta)}{24}(b-a)^3$.

解 (1) 左矩形公式，将 $f(x)$ 在 a 处展开，得

$$f(x)=f(a)+f'(\xi)(x-a),\quad \xi\in(a,x)$$

两边在$[a,b]$上积分，得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b f(a)\mathrm{d}x + \int_a^b f'(\xi)(x-a)\mathrm{d}x =$$

$$(b-a)f(a) + \int_a^b f'(\xi)(x-a)\mathrm{d}x$$

由于 $x-a$ 在 $[a,b]$ 上不变号，故由积分第二中值定理，有 $\eta\in(a,b)$，使

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = (b-a)f(a) + f'(\eta)\int_a^b (x-a)\mathrm{d}x$$

故有 $$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = (b-a)f(a) + \frac{1}{2}f'(\eta)(b-a)^2,\quad \eta\in(a,b)$$

(2) 右矩形公式，同(1)，将 $f(x)$ 在 b 点处展开并积分，得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = (b-a)f(b) - \frac{1}{2}f'(\eta)(b-a)^2,\quad \eta\in(a,b)$$

(3) 中矩形公式，将 $f(x)$ 在 $\frac{a+b}{2}$ 处展开，得

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left(x-\frac{a+b}{2}\right) +$$

$$\frac{1}{2}f''(\xi)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2,\quad \xi\in(a,b)$$

两边积分并利用积分中值定理，得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\int_a^b\left(x-\frac{a+b}{2}\right)\mathrm{d}x +$$

$$\frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2\mathrm{d}x =$$

$$(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2\mathrm{d}x =$$

$$(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{24}f''(\eta)(b-a)^3,\quad \eta\in(a,b)$$

6. 若用复化梯形公式计算积分 $I=\int_0^1 \mathrm{e}^x\mathrm{d}x$，问区间 $[0,1]$ 应分多少等分才能使截断误差不超过 $\frac{1}{2}\times10^{-5}$？若改用复化辛普森公式，要达到同样精度，区间应分多少等分？

解　由于 $f(x)=\mathrm{e}^x$，$f''(x)=f^{(4)}(x)=\mathrm{e}^x$，$b-a=1$，故对复化梯形公式，要求

$$|R_T(f)| = \left|-\frac{b-a}{12}h^2f''(\eta)\right| \leqslant \frac{1}{12}\left(\frac{1}{n}\right)^2\mathrm{e} \leqslant \frac{1}{2}\times10^{-5},\quad \eta\in(0,1)$$

即 $n^2 \geqslant \frac{e}{6} \times 10^5$，$n \geqslant 212.85$。取 $n = 213$，即将区间[0,1]分为 213 等分时可以满足误差要求.

用复化辛普森公式，要求

$$|R_S(f)| = \left| -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \right| \leqslant \frac{1}{180 \times 2^4}\left(\frac{1}{n}\right)^4 e \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-5}, \quad \eta \in (0,1)$$

即 $n^4 \leqslant \frac{e}{144} \times 10^4$，$n \geqslant 3.71$。取 $n = 4$，即将区间等分为 8 等分时可以满足误差要求.

7. 如果 $f''(x) > 0$，证明用梯形公式计算积分 $I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$ 所得结果比准确值 I 大，并说明其几何意义.

证明 由梯形公式的余项

$$R(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \quad \eta \in (a, b)$$

知，若 $f''(\eta) > 0$ 且 $b > a$，则 $R(f) < 0$，从而

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = T + R(f) < T$$

即计算值比准确值大.

其几何意义为，$f''(x) > 0$，故 $f(x)$ 为下凸函数，梯形面积大于曲边梯形面积. 如图 4.1 所示.

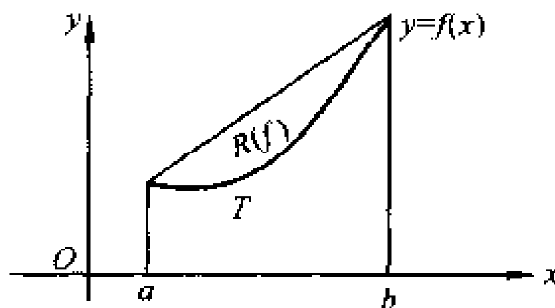

图 4.1

8. 用龙贝格求积分方法计算下列积分，使误差不超过 10^{-5}.

(1) $\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^1 e^{-x}\mathrm{d}x$； (2) $\int_0^{2\pi} x\sin x\mathrm{d}x$； (3) $\int_0^3 x\sqrt{1+x^2}\mathrm{d}x$.

解　(1) 计算如下表所示：

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$
0	0.771 743 3			
1	0.728 069 9	0.713 512 1		
2	0.716 982 8	0.713 287 0	0.713 272 0	
3	0.714 200 2	0.713 272 6	0.713 271 7	0.713 271 7

因此，$I \approx 0.713\,271\,7$.

(2) 计算如下表所示：

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$
0	$3.451\,313 \times 10^{-6}$	
1	$8.628\,283 \times 10^{-7}$	$-4.446\,923 \times 10^{-21}$

因此，$I \approx -4.446\,923 \times 10^{-21} \approx 0$.

(3) 计算如下表所示：

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$	$T_5^{(k)}$
0	14.230 249 5					
1	11.171 369 9	10.151 743 4				
2	10.443 796 8	10.201 272 5	10.204 574 4			
3	10.266 367 2	10.207 224 0	10.207 620 7	10.207 669 1		
4	10.222 270 2	10.207 571 2	10.207 594 3	10.207 593 9	10.207 593 6	
5	10.211 260 7	10.207 590 9	10.207 592 2	10.207 592 2	10.207 592 2	10.207 592 2

因此，$I \approx 10.207\,592\,2$.

9. 用 $n = 2, 3$ 的高斯-勒让德公式计算积分 $\int_1^3 e^x \sin x \mathrm{d}x$.

解　因为 $x \in [1,3]$，令 $t = x - 2$，则 $t \in [-1,1]$

故
$$\int_1^3 e^x \sin x \mathrm{d}x = \int_{-1}^1 e^{t+2} \sin(t+2) \mathrm{d}t$$

当 $n=2$ 时，

$$\int_1^3 e^x \sin x\,dx \approx 0.555\,555\,6\times[f(-0.774\,596\,7)+f(0.774\,596\,7)]+$$
$$0.888\,888\,9\times f(0)=10.948\,4$$

当 $n=3$ 时，

$$\int_1^3 e^x \sin x\,dx \approx 0.347\,854\,8\times[f(-0.861\,136\,3)+f(0.861\,136\,3)]+$$
$$0.652\,145\,2\times[f(-0.339\,981\,0)+f(0.339\,981\,0)]=$$
$$10.950\,14$$

10. 地球卫星轨道是一个椭圆，椭圆周长的计算公式是

$$S=a\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sqrt{1-\left(\frac{c}{a}\right)^2\sin^2\theta}\,d\theta$$

这里 a 是椭圆的长半轴，c 是地球中心与轨道中心（椭圆中心）的距离，记 h 为近地点距离，H 为远地点距离，$R=6\,371$ km 为地球半径，则

$$a=\frac{2R+H+h}{2},\quad c=\frac{H-h}{2}$$

我国第一颗人造地球卫星近地点距离为 $h=439$ km，远地点距离为 $H=2\,384$ km，试求卫星轨道的周长．

解

$$a=\frac{1}{2}(2R+H+h)=7\,782.5$$

$$c=\frac{1}{2}(H-h)=972.5$$

$$f(\theta)=\sqrt{1-\left(\frac{972.5}{7\,782.5}\right)^2\sin^2\theta}$$

计算积分采用龙贝格算法，计算下表所示：

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$
0	1.564 640 3			
1	1.564 646 3	1.564 648 3		
2	1.564 646 3	1.564 646 3	1.564 646 2	
3	1.564 646 3	1.564 646 3	1.564 646 3	1.564 646 3

因 $|T_3^{(0)}-T_2^{(1)}|=10^{-7}<\frac{1}{2}\times10^{-6}$，故积分已有 7 位有效数字，取

$$I = 1.564\ 646,\quad S = 4aI \approx 48\ 707.44\ \text{km}$$

11. 证明等式

$$n\sin\frac{\pi}{n} = \pi - \frac{\pi^3}{3!n^2} + \frac{\pi^5}{5!n^4} - \cdots$$

试依据 $n\sin\frac{\pi}{n}(n = 3, 6, 12)$ 的值，用外推算法求 π 的近似值．

证明　若 $f(n) = n\sin\frac{\pi}{n}$，此函数的泰勒展开式为

$$n\sin\frac{\pi}{n} = n\left[\frac{\pi}{n} - \frac{1}{3!}\left(\frac{\pi}{n}\right)^3 + \frac{1}{5!}\left(\frac{\pi}{n}\right)^5 - \frac{1}{7!}\left(\frac{\pi}{n}\right)^7 + \cdots\right] =$$

$$\pi - \frac{\pi^3}{3!n^2} + \frac{\pi^5}{5!n^4} - \frac{\pi^7}{7!n^6} + \cdots =$$

$$\pi\left[1 - \frac{1}{3!}\left(\frac{\pi}{n}\right)^2 + \frac{1}{5!}\left(\frac{\pi}{n}\right)^4 - \frac{1}{7!}\left(\frac{\pi}{n}\right)^6 + \cdots\right]$$

若记 $T_n^{(0)} = n\sin\frac{\pi}{n} \approx \pi$，其误差为 $O\left(\left(\frac{\pi}{n}\right)^2\right)$.

由外推法，$T_n^{(1)} = \frac{1}{3}(4T_{2n}^{(0)} - T_n^{(0)}) \approx \pi$，其误差为 $O\left(\left(\frac{\pi}{n}\right)^4\right)$. $T_n^{(2)} = \frac{1}{15}(16T_{2n}^{(1)} - T_n^{(1)}) \approx \pi$，其误差为 $O\left(\left(\frac{\pi}{n}\right)^6\right)$.

据上述公式列表计算下表所示：

n	$T_n^{(0)} = n\sin\frac{\pi}{n}$	$T_n^{(1)}$	$T_n^{(2)}$
3	2.598 076		
6	3.000 000	3.133 975	
12	3.105 829	3.141 705	3.141 580

故 $\pi \approx 3.141\ 58$.

12. 用下列方法计算积分 $\int_1^3 \frac{dy}{y}$，并比较结果．

(1) 龙贝格方法；

(2) 三点及五点高斯公式；

(3) 将积分区间四等分，用复化两点高斯公式．

解　(1) 计算见下表：

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$
0	1.333 333				
1	1.166 667	1.111 111			
2	1.116 667	1.100 000	1.099 259		
3	1.103 211	1.098 725	1.098 640	1.098 631	
4	1.099 768	1.098 620	1.098 613	1.098 613	1.098 613

取 $I = 1.098\ 613$.

(2) 积分区间[1, 3],采用高斯公式时,需先变换到[−1, 1]上. 故作变换

$$y = \frac{1}{2}(a+b) + \frac{1}{2}(b-a)t = t+2$$

则当 $y \in [1, 3]$ 时,$t \in [-1, 1]$,且 $dy = dt$, $\int_1^3 \frac{dy}{y} = \int_{-1}^1 \frac{dt}{t+2}$.

三点高斯公式

$$\int_1^3 \frac{dy}{y} = \int_{-1}^1 \frac{dt}{t+2} \approx 0.555\ 555\ 6\left(\frac{1}{2-0.774\ 596\ 7} + \frac{1}{2+0.774\ 596\ 7}\right) +$$

$$0.888\ 888\ 9 \times \frac{1}{2+0} = 1.098\ 039$$

五点高斯公式

$$\int_1^3 \frac{dy}{y} = \int_{-1}^1 \frac{dt}{t+2} \approx 0.236\ 926\ 9\left(\frac{1}{2-0.906\ 179\ 8} + \frac{1}{2+0.906\ 179\ 8}\right) +$$

$$0.478\ 628\ 9\left(\frac{1}{2-0.538\ 469\ 3} + \frac{1}{2+0.538\ 469\ 3}\right) +$$

$$0.568\ 888\ 9 \times \frac{1}{2+0} = 1.098\ 609$$

(3) 将区间[1, 3]四等分,在每个小区间上用两点高斯公式,得

$$I_1 = \int_1^{1.5} \frac{dy}{y} = \int_{-1}^1 \frac{0.5dt}{2.5+0.5t} \approx$$

$$0.5 \times \left[\frac{1}{2.5+0.5\times\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)} + \frac{1}{2.5+0.5\times\frac{1}{\sqrt{3}}}\right] = 0.405\ 405\ 4$$

$$I_2 = \int_{1.5}^2 \frac{dy}{y} = \int_{-1}^1 \frac{0.5dt}{3.5+0.5t} \approx$$

$$0.5\times\left[\frac{1}{3.5+0.5\times\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)}+\frac{1}{3.5+0.5\times\frac{1}{\sqrt{3}}}\right]=0.287\ 671\ 2$$

$$I_3=\int_2^{2.5}\frac{dy}{y}=\int_{-1}^{1}\frac{0.5dt}{4.5+0.5t}\approx$$

$$0.5\times\left[\frac{1}{4.5+0.5\times\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)}+\frac{1}{4.5+0.5\times\frac{1}{\sqrt{3}}}\right]=0.223\ 140\ 5$$

$$I_4=\int_{2.5}^{3}\frac{dy}{y}=\int_{-1}^{1}\frac{0.5dt}{5.5+0.5t}\approx$$

$$0.5\times\left[\frac{1}{5.5+0.5\times\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)}+\frac{1}{5.5+0.5\times\frac{1}{\sqrt{3}}}\right]=0.182\ 320\ 4$$

故
$$I=I_1+I_2+I_3+I_4\approx 1.098\ 538$$

13. 用三点公式和积分方法求 $f(x)=\frac{1}{(1+x)^2}$ 在 $x=1.0, 1.1$ 和 1.2 处的导数值，并估计误差．$f(x)$ 的值由下表给出：

x	1.0	1.1	1.2
$f(x)$	0.250 0	0.226 8	0.206 6

解 由带余项的三点求导公式可知

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi_0)$$

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]-\frac{1}{6}h^2f'''(\xi_1)$$

$$f'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi_2)$$

$$\xi_i\in(x_0,x_2),\ i=0,1,2$$

取上表中 $x_0=1.0$，$x_1=1.1$，$x_2=1.2$，分别将有关数值代入以上三式，即可得导数近似值．

由于 $|f'''(\xi_i)|\leqslant\max\limits_{1.0\leqslant x\leqslant 1.2}|f'''(x)|=\max\limits_{1.0\leqslant x\leqslant 1.2}\left|\frac{4!}{(1+x)^5}\right|=\frac{4!}{2^5}=0.75$

从而可求得误差上限与导数值如下表所示：

x	1.0	1.1	1.2
三点公式	−0.247	−0.217	−0.187
误　差	0.002 5	0.001 25	0.002 5
理论解	−0.25	−0.215 959 4	−0.187 828 7

数值积分法．设 $\varphi(x) = f'(x)$，由

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} \varphi(x)\mathrm{d}x$$

对积分采用梯形公式，得

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + \frac{x_{k+1} - x_k}{2}[\varphi(x_k) + \varphi(x_{k+1})] - \frac{(x_{k+1} - x_k)^3}{12}\varphi''(\eta_k), \quad \eta_k \in (x_k, x_{k+1})$$

令 $k = 0, 1$，得

$$\varphi(x_0) + \varphi(x_1) \approx \frac{2}{h}[f(x_1) - f(x_0)]$$

$$\varphi(x_1) + \varphi(x_2) \approx \frac{2}{h}[f(x_2) - f(x_1)]$$

同样对　$f(x_{k+1}) = f(x_{k-1}) + \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} \varphi(x)\mathrm{d}x$

有　$$f(x_{k+1}) = f(x_{k-1}) + \frac{x_{k+1} - x_{k-1}}{2}[\varphi(x_{k+1}) + \varphi(x_{k-1})] - \frac{(x_{k+1} - x_{k-1})^3}{12}\varphi''(\eta_k), \quad \eta_k \in (x_{k-1}, x_{k+1})$$

从而有

$$\varphi(x_0) + \varphi(x_2) \approx \frac{1}{h}[f(x_2) - f(x_0)]$$

代入数值，解方程，即得 $\varphi(x_k)(k = 0, 1, 2)$ 如下表所示：

x	1.0	1.1	1.2
数值解	−0.247	−0.217	−0.187
理论解	−0.25	−0.215 959 4	−0.187 828 7
误　差	0.003	0.001 040 6	0.000 828 7

第5章　解线性方程组的直接方法

1.1　重点、难点全析

1.1.1　高斯消去法

对方程组 $Ax = b$，其中 A 非奇异．高斯消去法是将方程组约化为一个上三角形方程组，然后回代求解．而高斯-若当消去法是将方程组的系数矩阵约化为单位阵，则相应的右端列向量就约化为方程组的解．在消元过程中，为避免主元素相对其他元素过小，以致引起舍入误差过大的情形，可将同列中绝对值最大的元素换到主元素位置上，即为列主元素消去法．

利用消去法可求矩阵的逆、行列式及解系数矩阵相同的线性方程组系．

1.1.2　矩阵三角分解法

高斯消元过程实现了 A 的一个三角因子分解 $A = LU$，其中 L 为单位下三角阵，U 为上三角阵．此分解称为 A 的杜利特尔(Doolittle)分解．

定理5.1　A 有唯一的 Doolittle 分解的充要条件是 A 的前 $n-1$ 个顺序主子式均不为零．

定理5.2　若 A 对称，且 A 的所有顺序主子式均不零，则 A 有唯一的分解式

$$A = LDL^{T}$$

其中 L 为单位下三角阵，D 为对角阵．

定理5.3　若 A 对称正定，则存在一个实非奇异下三角阵 L，使 $A = LL^{T}$．当限定 L 的对角元为正时，这种分解是唯一的．

对定理5.3的分解式，因分解过程中有开方运算，故称平方根分解或 Cholesky 分解．

A 分解后，解方程组 $Ax = b$ 等价于解两个三角形方程组

$$\begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases} \text{或当} A \text{对称正定时,} \begin{cases} Ly = b \\ L^T x = y \end{cases}$$

1.1.3 向量和矩阵的范数

1. 定义 在 $\mathbf{R}^n$ 上的实值函数 $\| \cdot \|$ 称为向量范数,如果对 $\mathbf{R}^n$ 中的任意向量 x 和 y,它满足:

(1) 非负性:$\| x \| \geq 0$,且仅当 $x = 0$ 时 $\| x \| = 0$;

(2) 齐次性:对任一数 $k \in \mathbf{R}$,有 $\| kx \| = | k | \, \| x \|$;

(3) 成立三角不等式:$\| x + y \| \leqslant \| x \| + \| y \|$.

2. 常用的向量范数是 p-范数.

∞-范数(最大范数): $\| x \|_\infty = \max\limits_{1 \leqslant i \leqslant n} | x_i |$

1-范数: $\| x \|_1 = \sum\limits_{i=1}^{n} | x_i |$

2-范数: $\| x \|_2 = \left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$

p-范数: $\| x \|_p = \left(\sum\limits_{i=1}^{n} | x_i |^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad 1 \leqslant p < +\infty$

3. 定义 定义在 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 上的实值函数 $\| \cdot \|$ 称为矩阵范数,如果对于 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 中的任意矩阵 A 和 B,它满足:

(1) $\| A \| \geqslant 0$,且仅当 $A = 0$ 时 $\| A \| = 0$;

(2) 对任一数 $k \in \mathbf{R}$,有 $\| kA \| = | k | \, \| A \|$;

(3) $\| A + B \| \leqslant \| A \| + \| B \|$;

(4) $\| AB \| \leqslant \| A \| \, \| B \|$.

4. 常用的矩阵范数

∞-范数(行范数): $\| A \|_\infty = \max\limits_{1 \leqslant i \leqslant n} \sum\limits_{j=1}^{n} | a_{ij} |$

1-范数(列范数): $\| A \|_1 = \max\limits_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum\limits_{i=1}^{n} | a_{ij} |$

2-范数: $\| A \|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$

F-范数: $\| A \|_F = \left(\sum\limits_{i,j=1}^{n} a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$

其中 $\lambda_{\max}(A^T A)$ 表示半正定矩阵 $A^T A$ 的最大特征值. 矩阵的前三种范数分别与

向量的∞-范数、1-范数以及2-范数相容.

1.1.4　误差分析

设 $\|\cdot\|_v$ 为非奇异矩阵 A 的某种算子范数. 称数 $\mathrm{Cond}(A)_v = \|A\|_v\|A^{-1}\|_v(v=1,2$ 或 $\infty)$ 为矩阵 A 的条件数. 当 A 的条件数 $\mathrm{Cond}(A)_v \gg 1$ 时,称方程组 $Ax=b$ 是"病态"的,否则称为"良态"的."病态"方程组很难用常规方法求得比较准确的解,但对其中部分方程组,可通过余量校正迭代求解方程组.

1.1.5　矩阵的正交三角化及应用

(1) 设向量 $w\in\mathbf{R}^n$ 且 $w^{\mathrm T}w=1$,则称矩阵 $H(w)=I-2ww^{\mathrm T}$ 为初等反射阵(或称豪斯霍尔德(Householder)变换). 它在计算上的作用是实现约化向量与矩阵,如对向量 $x\neq 0$,则可选择 H 使 $Hx=\pm\|x\|_2 e_1$.

(2) 平面旋转变换,又称Givens变换,可通过选择平面旋转矩阵,将向量中指定元素变为零.

(3) 矩阵的 QR 分解. 使用多次初等反射变换或平面旋转变换,可实现 A 的分解 $A=QR$,其中 Q 为正交矩阵,R 为上三角阵. 当限定 R 对角元为正时,此分解唯一.

(4) 利用 A 的正交约化可求解超定方程组.

1.2　习题全解

1. 设 A 是对称阵且 $a_{11}\neq 0$,经过高斯消去法一步后,A 约化为 $\begin{bmatrix} a_{11} & a_1^{\mathrm T} \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}$,证明 A_2 是对称矩阵.

证明　由消元公式及 A 的对称性得

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}}a_{1j} = a_{ji} - \frac{a_{j1}}{a_{11}}a_{1i} = a_{ji}^{(2)},\quad i,j=2,3,\cdots,n$$

故 A_2 是对称矩阵.

2. 设 $A=(a_{ij})_n$ 是对称正定矩阵,经过高斯消去法一步后 A 约化为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_1^{\mathrm T} \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}$$

其中 $A_2=(a_{ij}^{(2)})_{n-1}$，证明：

(1) A 的对角元素 $a_{ii}>0(i=1,2,\cdots,n)$；

(2) A_2 是对称正定矩阵.

证明 (1) 因 A 对称正定，故

$$a_{ii}=(Ae_i,e_i)=e_i^{\mathrm{T}}Ae_i>0,\quad i=1,2,\cdots,n$$

其中 $e_i=(0,\cdots,0,\overset{i}{1},0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}$ 为第 i 个单位向量.

(2) 由 A 的对称性及消元公式得

$$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}-\frac{a_{i1}}{a_{11}}a_{1j}=a_{ji}-\frac{a_{j1}}{a_{11}}a_{1i}=a_{ji}^{(2)},\quad i,j=2,\cdots,n$$

故 A_2 也对称.

又
$$\begin{bmatrix}a_{11} & \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\\ 0 & A_2\end{bmatrix}=L_1A$$

其中
$$L_1=\begin{bmatrix}1 & & & \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -\frac{a_{n1}}{a_{11}} & \cdots & & 1\end{bmatrix}$$

显然 L_1 非奇异，$\forall\, x\neq 0$，有

$$L_1^{\mathrm{T}}x\neq 0,(x,L_1AL_1^{\mathrm{T}}x)=(L_1^{\mathrm{T}}x,AL_1^{\mathrm{T}}x)>0\quad(\text{由 } A \text{ 的正定性})$$

故 $L_1AL_1^{\mathrm{T}}$ 为正定矩阵.

又 $L_1AL_1^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_{11} & 0\\ 0 & A_2\end{bmatrix}$，而 $a_{11}>0$，故 A_2 为正定矩阵.

3. 设 L_k 为指标为 k 的初等下三角阵（除第 k 列对角元以下元素外，L_k 和单位阵 I 相同），即

$$L_k=\begin{bmatrix}1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & m_{n,k} & & & 1\end{bmatrix}$$
（第 k 列）

求证当 $i,j>k$ 时，$\widetilde{L}_k=I_{ij}L_kI_{ij}$ 也是一个指标为 k 的初等下三角阵，其中 I_{ij} 为初等置换阵．

证明　因为

$$L_k=\begin{bmatrix}1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & m_{n,k} & & & 1\end{bmatrix}$$

且 I_{ij} 为初等置换阵，当 $i,j>k$ 时，将 L_k 的第 i 行和第 j 行互换

$$I_{ij}L_k=\begin{bmatrix}1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & m_{k+1,k} & \ddots & & & & \\ & & \vdots & & 0 & \cdots & 1 & \\ & & & & \vdots & \ddots & \vdots & \\ & & m_{n,k} & & 1 & \cdots & 0 & \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1\end{bmatrix}\begin{matrix}\\ \\ \\ \\ i\\ \\ j\\ \\ \\ \end{matrix}$$

将 $I_{ij}L_k$ 的第 i 列与第 j 列互换

$$I_{ij}L_kI_{ij}=L_k=\widetilde{L}_k$$

所以 $\widetilde{L}_k$ 为指标为 k 的初等下三角阵。

4．试推导矩阵 A 的 Crout 分解 $A=LU$ 的计算公式，其中 L 为下三角矩阵，U 为单位上三角矩阵．

解　矩阵 A 的 Crout 分解 $A=LU$

$$A=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & u_{12} & \cdots & u_{1n}\\ & 1 & \cdots & u_{2n}\\ & & \ddots & \vdots\\ & & & 1\end{bmatrix}$$

由矩阵乘法知　　$a_{i1}=l_{i1}u_{11}=l_{i1},\quad i=1,2,\cdots,n$

故　　$l_{i1}=a_{i1},\quad i=1,2,\cdots,n$

又由 $a_{1j}=l_{11}u_{1j}$，故 $u_{1j}=\dfrac{a_{1j}}{l_{11}}$，$j=2,3,\cdots,n$．

假设 L 的前 $k-1$ 列和 U 的前 $k-1$ 行已知．由

$$a_{ik}=\sum_{r=1}^{k} l_{ir}u_{rk}=\sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}u_{rk}+l_{ik},\quad i=k,k+1,\cdots,n$$

故
$$l_{ik}=a_{ik}-\sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}u_{rk},\quad i=k,k+1,\cdots,n$$

同理有

$$a_{kj}=\sum_{r=1}^{k} l_{kr}u_{rj}=\sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj}+l_{kk}u_{kj},\quad j=k+1,k+2,\cdots,n$$

故
$$u_{kj}=\frac{a_{kj}-\sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj}}{l_{kk}},\quad j=k+1,k+2,\cdots,n$$

综合上面推导结果得 Crout 分解公式为

$$\begin{cases} l_{i1}=a_{i1}, & i=1,2,\cdots,n \\ u_{1j}=\dfrac{a_{1j}}{l_{11}}, & j=2,3,\cdots,n \\ l_{ik}=a_{ik}-\sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}u_{rk}, & i=k,k+1,\cdots,n \\ u_{kj}=\dfrac{a_{kj}-\sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj}}{l_{kk}}, & j=k+1,k+2,\cdots,n,\ k=2,3,\cdots,n \end{cases}$$

5．设 $Ux=d$，其中 U 为三角矩阵．

(1) 就 U 为上及下三角矩阵推导一般的求解公式，并写出算法；

(2) 计算解三角形方程组 $Ux=d$ 的乘除法次数；

(3) 设 U 为非奇异阵，试推导求 U^{-1} 的计算公式．

解 (1) 设 U 为上三角阵

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

因 $u_{nn}x_n=d_n$，故 $x_n=\dfrac{d_n}{u_{nn}}$.

因 $u_{ii}x_i+\sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j=d_i$，故

$$x_i = \frac{d_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_i}{u_{ii}}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1$$

当 U 为下三角阵时，

$$\begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ u_{21} & u_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ u_{n1} & u_{n2} & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

得 $x_1 = \dfrac{d_1}{u_{11}}$，$x_i = \dfrac{d_i - \sum_{j=1}^{i-1} u_{ij} x_j}{u_{ii}}$，$i = 2, 3, \cdots, n$.

(2) 除法次数为 n，乘法次数为

$$1 + 2 + \cdots + (n-1) = \frac{n(n-1)}{2}$$

故总的乘除法次数为 $n + \dfrac{n(n-1)}{2} = \dfrac{n(n+1)}{2}$.

(3) 设 U 为上三角阵，记 $U^{-1} = S$，则 S 也是上三角阵．由

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1n} \\ & s_{22} & \cdots & s_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & s_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

得
$$u_{ii} s_{ii} = 1, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

$$s_{ij} = -\frac{\sum_{k=i+1}^{j} u_{ik} s_{kj}}{u_{ii}}, \quad j = i+1, i+2, \cdots, n;\ i = n-1, n-2, \cdots, 1$$

当 U 为下三角阵时，由

$$\begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ u_{21} & u_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ u_{n1} & u_{n2} & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_{11} & & & \\ s_{21} & s_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ s_{n1} & s_{n2} & \cdots & s_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

得
$$u_{ii} s_{ii} = 1, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

$$s_{ij} = -\frac{\sum_{k=1}^{i-1} u_{ik} s_{kj}}{u_{ii}}, \quad j = 1, 2, \cdots, i-1;\ i = 2, 3, \cdots, n$$

6. 证明:(1) 如果 A 是对称正定阵,则 A^{-1} 也是对称正定阵;

(2) 如果 A 是对称正定阵,则 A 可唯一地写成 $A = LL^T$,其中 L 是具有正对角元的下三角阵.

证明 (1) 因为 A 是对称正定阵,故它的特征值 λ_i 全大于 0,A^{-1} 的特征值 λ_i^{-1} 也全大于 0. 又

$$(A^{-1})^T = (A^T)^{-1} = A^{-1}$$

故 A^{-1} 是对称正定矩阵.

(2) 因为 A 对称正定,故 A 的所有顺序主子式均不为零,从而 A 有唯一的 Doolittle 分解 $A = \bar{L}U$. 又

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \cdots & \frac{u_{1n}}{u_{11}} \\ & 1 & \cdots & \frac{u_{2n}}{u_{22}} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix} = DU_0$$

其中 D 为对角阵,U_0 为单位上三角阵,于是

$$A = \bar{L}U = \bar{L}DU_0$$

又

$$A = A^T = U_0^T D\bar{L}^T$$

由分解的唯一性即得

$$U_0^T = \bar{L}$$

从而有

$$A = \bar{L}D\bar{L}^T$$

又由 A 的对称正定性知

$$d_1 = D_1 > 0, \quad d_i = \frac{D_i}{D_{i-1}} > 0, \quad i = 2, 3, \cdots, n$$

故

$$D = \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \sqrt{d_1} & & & \\ & \sqrt{d_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{d_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{d_1} & & & \\ & \sqrt{d_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{d_n} \end{bmatrix} = D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}}$$

故

$$A = \bar{L}D\bar{L}^T = \bar{L}D^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}\bar{L}^T = (\bar{L}D^{\frac{1}{2}})(\bar{L}D^{\frac{1}{2}})^T = LL^T$$

即矩阵 A 可唯一地分解为 $A = LL^T$，其中 $L = \bar{L}D^{\frac{1}{2}}$ 为对角元为正的下三角形矩阵.

7. 用高斯-若当方法求 A 的逆矩阵，其中

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -3 & -1 \\ 3 & 1 & 0 & 7 \\ -1 & 2 & 4 & -2 \\ 1 & 0 & -1 & 5 \end{bmatrix}$$

解　$$[A \mid I] = \left[\begin{array}{cccc|cccc} 2 & 1 & -3 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 7 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 4 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 5 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right] \to$$

$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 0 & -1 & 5 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 3 & -8 & 0 & 1 & 0 & -3 \\ 0 & 2 & 3 & 3 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & -11 & 1 & 0 & 0 & -2 \end{array}\right] \to$$

$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 0 & -1 & 5 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 3 & -8 & 0 & 1 & 0 & -3 \\ 0 & 0 & -3 & 19 & 0 & -2 & 1 & 7 \\ 0 & 0 & -4 & -3 & 1 & -1 & 0 & 1 \end{array}\right] \to$$

$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 0 & 0 & -\frac{4}{3} & 0 & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{4}{3} \\ 0 & 1 & 0 & 11 & 0 & -1 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{19}{3} & 0 & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{7}{3} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{85}{3} & 1 & \frac{5}{3} & -\frac{4}{3} & -\frac{25}{3} \end{array}\right] \to$$

$$\left[\begin{array}{cccc:cccc} 1 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{85} & \frac{10}{17} & -\frac{23}{85} & -\frac{16}{17} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{33}{85} & -\frac{6}{17} & \frac{41}{85} & \frac{13}{17} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -\frac{19}{85} & \frac{5}{17} & -\frac{3}{85} & -\frac{8}{17} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{85} & -\frac{1}{17} & \frac{4}{85} & \frac{5}{17} \end{array}\right]$$

故

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\begin{bmatrix} \frac{4}{85} & \frac{10}{17} & -\frac{23}{85} & -\frac{16}{17} \\ \frac{33}{85} & -\frac{6}{17} & \frac{41}{85} & \frac{13}{17} \\ -\frac{19}{85} & \frac{5}{17} & -\frac{3}{85} & -\frac{8}{17} \\ -\frac{3}{85} & -\frac{1}{17} & \frac{4}{85} & \frac{5}{17} \end{bmatrix}=$$

$$\begin{bmatrix} 0.047\,058\,9 & 0.588\,235\,3 & -0.270\,588\,2 & -0.941\,176\,5 \\ 0.388\,235\,3 & -0.352\,941\,2 & 0.482\,352\,9 & 0.764\,705\,9 \\ -0.223\,529\,4 & 0.294\,117\,6 & -0.035\,294\,1 & -0.470\,588\,2 \\ -0.035\,294\,1 & -0.058\,823\,5 & 0.047\,058\,9 & 0.294\,117\,6 \end{bmatrix}$$

8. 用追赶法解三对角方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

解 设有分解

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & \alpha_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \alpha_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \alpha_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & \alpha_5 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \beta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \beta_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

由公式

$$\begin{cases} b_1 = \alpha_1, \ c_1 = \alpha_1\beta_1 \\ b_i = a_i\beta_{i-1} + \alpha_i, & i = 2, 3, 4, 5 \\ c_i = \alpha_i\beta_i, & i = 2, 3, 4 \end{cases}$$

其中 b_i，a_i，c_i 分别是系数矩阵的主对角线元素及其下边和上边的次对角线元素．故有

$$\alpha_1 = 2, \quad \alpha_2 = \frac{3}{2}, \quad \alpha_3 = \frac{4}{3}, \quad \alpha_4 = \frac{5}{4}, \quad \alpha_5 = \frac{6}{5}$$

$$\beta_1 = -\frac{1}{2}, \quad \beta_2 = -\frac{2}{3}, \quad \beta_3 = -\frac{3}{4}, \quad \beta_4 = -\frac{4}{5}$$

由

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \frac{4}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \frac{5}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & \frac{6}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

解得　$y_1 = \frac{1}{2}, \quad y_2 = \frac{1}{3}, \quad y_3 = \frac{1}{4}, \quad y_4 = \frac{1}{5}, \quad y_5 = \frac{1}{6}$

由

$$\begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -\frac{4}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{5} \\ \frac{1}{6} \end{bmatrix}$$

解得 $x_5 = \frac{1}{6}$，$x_4 = \frac{1}{3}$，$x_3 = \frac{1}{2}$，$x_2 = \frac{2}{3}$，$x_1 = \frac{5}{6}$

故 $$\boldsymbol{x} = \left(\frac{5}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}\right)^{\mathrm{T}}$$

9. 用改进的平方根法解方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & -2 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}$$

解 设

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & -2 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ l_{21} & 1 & \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & \\ & d_2 & \\ & & d_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & l_{31} \\ & 1 & l_{32} \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

由矩阵乘法得

$$d_1 = 2, \quad l_{21} = -\frac{1}{2}, \quad l_{31} = \frac{1}{2}$$

$$d_2 = -\frac{5}{2}, \quad l_{32} = -\frac{7}{5}$$

$$d_3 = \frac{27}{5}$$

由

$$\begin{bmatrix} 1 & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & \\ \frac{1}{2} & -\frac{7}{5} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}$$

得
$$y_1 = 4,\quad y_2 = 7,\quad y_3 = \frac{69}{5}$$

由
$$\begin{bmatrix} 2 & & \\ & -\frac{5}{2} & \\ & & \frac{27}{5} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ & 1 & -\frac{7}{5} \\ & & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 7 \\ \frac{69}{5} \end{bmatrix}$$

得
$$\begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ & 1 & -\frac{7}{5} \\ & & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & & \\ & -\frac{5}{2} & \\ & & \frac{27}{5} \end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix} 4 \\ 7 \\ \frac{69}{5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ -\frac{14}{5} \\ \frac{23}{9} \end{bmatrix}$$

故 $x_3 = \frac{23}{9} = 2.555\,555\,6$，$x_2 = \frac{7}{9} = 0.777\,777\,8$，$x_1 = \frac{10}{9} = 1.111\,111\,1$

即
$$\boldsymbol{x} = (1.111\,111\,1, 0.777\,777\,8, 2.555\,555\,6)^{\mathrm{T}}$$

10. 下述矩阵能否分解为$\boldsymbol{LU}$（其中$\boldsymbol{L}$为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$为上三角阵）？若能分解，那么分解是否唯一？

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 1 \\ 4 & 6 & 7 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 1 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 6 \\ 2 & 5 & 15 \\ 6 & 15 & 46 \end{bmatrix}$$

解　$\boldsymbol{A}$ 中 $\Delta_2 = 0$，故不能分解．但 $\det(\boldsymbol{A}) = -10 \neq 0$，故若将 $\boldsymbol{A}$ 中第一行与第三行交换，则可以分解，且分解唯一．

$\boldsymbol{B}$ 中，$\Delta_2 = \Delta_3 = 0$，但它仍可以分解为

$$\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ 3 & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & l_{32} - 2 \end{bmatrix}$$

其中 l_{32} 为一任意常数，且 $\boldsymbol{U}$ 奇异，故分解不唯一．

对 $\boldsymbol{C}$，$\Delta_i \neq 0$，$i = 1, 2, 3$，故 $\boldsymbol{C}$ 可分解且分解唯一．

$$\boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ 6 & 3 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 2 & 6 \\ & 1 & 3 \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

11. 设 $\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0.6 & 0.5 \\ 0.1 & 0.3 \end{bmatrix}$，计算 $\boldsymbol{A}$ 的行范数、列范数、2-范数以及 F-范数．

解

$$\|A\|_\infty = \max_{1\leq i\leq 2}\sum_{j=1}^{2}|a_{ij}| = 1.1$$

$$\|A\|_1 = \max_{1\leq j\leq 2}\sum_{i=1}^{2}|a_{ij}| = 0.8$$

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{2}a_{ij}^2} = \sqrt{0.71} \approx 0.842\ 6$$

$$A^TA = \begin{bmatrix}0.6 & 0.1\\ 0.5 & 0.3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.6 & 0.5\\ 0.1 & 0.3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0.37 & 0.33\\ 0.33 & 0.34\end{bmatrix}$$

$$\lambda_{\max}(A^TA) = 0.685\ 34$$

故

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)} = 0.827\ 85$$

12. 求证：(1) $\|x\|_\infty \leqslant \|x\|_1 \leqslant n\|x\|_\infty$；

(2) $\frac{1}{\sqrt{n}}\|A\|_F \leqslant \|A\|_2 \leqslant \|A\|_F$.

证明　(1) 由定义知

$$\|x\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n}|x_i| \leqslant \sum_{i=1}^{n}|x_i| =$$

$$\|x\|_1 \leqslant \sum_{i=1}^{n}\max_{1\leq i\leq n}|x_i| = \sum_{i=1}^{n}\|x\|_\infty = n\|x\|_\infty$$

即

$$\|x\|_\infty \leqslant \|x\|_1 \leqslant n\|x\|_\infty$$

(2) 由范数定义，有

$$\|A\|_2^2 = \lambda_{\max}(A^TA) \leqslant \lambda_1(A^TA) + \lambda_2(A^TA) + \cdots + \lambda_n(A^TA) = \mathrm{tr}(A^TA) =$$

$$\sum_{i=1}^{n}a_{i1}^2 + \sum_{i=1}^{n}a_{i2}^2 + \cdots + \sum_{i=1}^{n}a_{in}^2 = \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}a_{ij}^2 = \|A\|_F^2$$

$$\|A\|_2^2 = \lambda_{\max}(A^TA) \geqslant$$

$$\frac{1}{n}[\lambda_1(A^TA) + \lambda_2(A^TA) + \cdots + \lambda_n(A^TA)] = \frac{1}{n}\|A\|_F^2$$

故

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\|A\|_F \leqslant \|A\|_2 \leqslant \|A\|_F$$

13. 设 $P \in \mathbf{R}^{n\times n}$ 且非奇异，又设 $\|x\|$ 为 $\mathbf{R}^n$ 上一向量范数，定义 $\|x\|_P = \|Px\|$，试证明 $\|x\|_P$ 是 $\mathbf{R}^n$ 上向量的一种范数.

证明　(1) 因 P 非奇异，故对任意的 $x \neq \mathbf{0}$，有 $Px \neq \mathbf{0}$，故 $\|x\|_P = \|Px\| \geqslant 0$，当且仅当 $x = \mathbf{0}$ 时，有 $\|x\|_P = \|Px\| = 0$ 成立.

(2) 对任意 $\alpha \in \mathbf{R}^1$，有

$$\|\alpha x\|_p = \|P\alpha x\| = |\alpha| \|Px\| = |\alpha| \|x\|_p$$

(3) $\|x+y\|_p = \|P(x+y)\| = \|Px+Py\| \leqslant \|Px\| + \|Py\| = \|x\|_p + \|y\|_p$

故 $\|x\|_p$ 是 $\mathbf{R}^n$ 上向量的一种范数.

14. 设 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ 为对称正定矩阵,定义 $\|x\|_A = (Ax, x)^{\frac{1}{2}}$,试证明 $\|x\|_A$ 为 $\mathbf{R}^n$ 上的一种向量范数.

证明　(1) 因 A 正定对称,故当 $x = 0$ 时,$\|x\|_A = 0$,而当 $x \neq 0$ 时,$\|x\|_A = (x^TAx)^{\frac{1}{2}} > 0$.

(2) 对任何实数 α,有

$$\|\alpha x\|_A = \sqrt{(\alpha x)^TA(\alpha x)} = |\alpha| \sqrt{x^TAx} = |\alpha| \|x\|_A$$

(3) 因 A 正定,故 A 可唯一地写成 $A = LL^T$,则

$$\|x\|_A = (x^TAx)^{\frac{1}{2}} = (x^TLL^Tx)^{\frac{1}{2}} = ((L^Tx)^T(L^Tx))^{\frac{1}{2}} = \|L^Tx\|_2$$

故对任意向量 x 和 y,总有

$$\|x+y\|_A = \|L^T(x+y)\|_2 = \|L^Tx + L^Ty\|_2 \leqslant \|L^Tx\|_2 + \|L^Ty\|_2 = \|x\|_A + \|y\|_A$$

故 $\|x\|_A = (x^TAx)^{\frac{1}{2}}$ 是一种向量范数.

15. 设 $\|A\|_s$、$\|A\|_t$ 为 $\mathbf{R}^{n\times n}$ 上任意两种矩阵算子范数,证明存在常数 $C_1, C_2 > 0$,使对一切 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ 满足

$$C_1 \|A\|_s \leqslant \|A\|_t \leqslant C_2 \|A\|_s$$

证明　因为

$$\|A\|_s = \max_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_s}{\|x\|_s}$$

由向量范数的等价性知,存在常数 $c_1', c_2' > 0$,使对任意 x,有

$$c_1' \|Ax\|_s \leqslant \|Ax\|_t \leqslant c_2' \|Ax\|_s$$

$$c_1' \|x\|_s \leqslant \|x\|_t \leqslant c_2' \|x\|_s$$

故

$$\frac{c_1' \|Ax\|_s}{c_2' \|x\|_s} \leqslant \frac{\|Ax\|_t}{\|x\|_t} \leqslant \frac{c_2' \|Ax\|_s}{c_1' \|x\|_s}$$

令 $\frac{c_1'}{c_2'} = C_1$,$\frac{c_2'}{c_1'} = C_2$,则有

$$C_1 \frac{\|Ax\|_s}{\|x\|_s} \leqslant \frac{\|Ax\|_t}{\|x\|_t} \leqslant C_2 \frac{\|Ax\|_s}{\|x\|_s}$$

$$C_1 \max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_s}{\|x\|_s} \leqslant \max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_t}{\|x\|_t} \leqslant C_2 \max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_s}{\|x\|_s}$$

即
$$C_1\|A\|_s \leqslant \|A\|_t \leqslant C_2\|A\|_s$$

16. 设 A 为非奇异矩阵,求证:

$$\frac{1}{\|A^{-1}\|_\infty} = \min_{y\neq 0}\frac{\|Ay\|_\infty}{\|y\|_\infty}$$

证明　$\|A^{-1}\|_\infty = \max_{x\neq 0}\frac{\|A^{-1}x\|_\infty}{\|x\|_\infty} \xrightarrow{\text{令 } A^{-1}x=y} \max_{y\neq 0}\frac{\|y\|_\infty}{\|Ay\|_\infty} =$

$$\max_{y\neq 0}\frac{1}{\dfrac{\|Ay\|_\infty}{\|y\|_\infty}}$$

故
$$\frac{1}{\|A^{-1}\|_\infty} = \min_{y\neq 0}\frac{\|Ay\|_\infty}{\|y\|_\infty}$$

17. 矩阵第一行乘以一数成为

$$A = \begin{bmatrix} 2\lambda & \lambda \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

证明当 $\lambda = \pm\frac{2}{3}$ 时, $\mathrm{Cond}(A)_\infty$ 有最小值.

证明　设 $\lambda \neq 0$,则

$$\|A\|_\infty = \begin{cases} 3|\lambda|, & |\lambda| \geqslant \frac{2}{3} \\ 2, & |\lambda| \leqslant \frac{2}{3} \end{cases}$$

又
$$A^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda} & -1 \\ -\frac{1}{\lambda} & 2 \end{bmatrix}$$

故
$$\|A^{-1}\|_\infty = \frac{1}{|\lambda|} + 2$$

$$\mathrm{Cond}(A)_\infty = \|A^{-1}\|_\infty \|A\|_\infty = \begin{cases} 6|\lambda| + 3, & |\lambda| \geqslant \frac{2}{3} \\ 2\left(2 + \frac{1}{|\lambda|}\right), & |\lambda| \leqslant \frac{2}{3} \end{cases}$$

故当 $|\lambda| = \frac{2}{3}$ 时,即 $\lambda = \pm\frac{2}{3}$ 时, $\mathrm{Cond}(A)_\infty$ 有最小值.此时

$$\min \mathrm{Cond}(A)_\infty = 7$$

18. 设 $A=\begin{bmatrix}100 & 99\\ 99 & 98\end{bmatrix}$，计算 A 的条件数 $\mathrm{Cond}(A)_v$ $(v=2,\infty)$.

解　$A^{-1}=\begin{bmatrix}-98 & 99\\ 99 & -100\end{bmatrix}$，　$\|A\|_\infty=199$，　$\|A^{-1}\|_\infty=199$

$$\mathrm{Cond}(A)_\infty=\|A^{-1}\|_\infty\|A\|_\infty=39\ 601$$

$$A^TA=\begin{bmatrix}19\ 801 & 19\ 602\\ 19\ 602 & 19\ 405\end{bmatrix}$$

故
$$\mathrm{Cond}(A)_2=\|A^{-1}\|_2\|A\|_2=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^TA)}{\lambda_{\min}(A^TA)}}=39\ 206$$

19. 证明：若 A 是正交阵，则 $\mathrm{Cond}(A)_2=1$.

证明　因 A 正交，故 $A^TA=AA^T=I$，$A^{-1}=A^T$，从而有

$$\|A\|_2=\sqrt{\rho(A^TA)}=\sqrt{\rho(I)}=1$$

$$\|A^{-1}\|_2=\|A^T\|_2=\sqrt{\rho(AA^T)}=\sqrt{\rho(I)}=1$$

故
$$\mathrm{Cond}(A)_2=\|A^{-1}\|_2\|A\|_2=1$$

20. 设 $A,B\in\mathbf{R}^{n\times n}$，且 $\|\cdot\|$ 为 $\mathbf{R}^{n\times n}$ 上矩阵的算子范数，证明：

$$\mathrm{Cond}(AB)\leqslant\mathrm{Cond}(A)\mathrm{Cond}(B)$$

证明　$\mathrm{Cond}(AB)=\|(AB)^{-1}\|\|AB\|\leqslant\|A^{-1}\|\|B^{-1}\|\|A\|\|B\|=$

$\|A^{-1}\|\|A\|\|B^{-1}\|\|B\|=\mathrm{Cond}(A)\mathrm{Cond}(B)$

21. 设 $Ax=b$，其中 $A\in\mathbf{R}^{n\times n}$ 为非奇异阵，证明：

(1) A^TA 为对称正定矩阵；

(2) $\mathrm{Cond}(A^TA)_2=[\mathrm{Cond}(A)_2]^2$.

证明　(1) $(A^TA)^T=A^T(A^T)^T=A^TA$，故 A^TA 为对称矩阵.

又 A 非奇异，故对 $\forall x\neq 0$，有 $Ax\neq 0$，从而有

$$x^TA^TAx=(Ax)^T(Ax)>0$$

即 A^TA 为对称正定矩阵.

(2) $\mathrm{Cond}(A^TA)_2=\|(A^TA)^{-1}\|_2\|A^TA\|_2=$

$\sqrt{\lambda_{\max}[((A^TA)^{-1})^T(A^TA)^{-1}]}\ \sqrt{\lambda_{\max}[(A^TA)^T(A^TA)]}=$

$\sqrt{\lambda_{\max}[((A^TA)^{-1})^2]}\ \sqrt{\lambda_{\max}[(A^TA)^2]}=$

$\sqrt{\lambda_{\max}^2(A^TA)^{-1}}\ \sqrt{\lambda_{\max}^2(A^TA)}=$

$\left[\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)^{-1}}\right]^2\left[\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}\right]^2=$

$\|A^{-1}\|_2^2\|A\|_2^2=[\mathrm{Cond}(A)_2]^2$

第6章 解线性方程组的迭代方法

1.1 重点、难点全析

1.1.1 迭代法基本概念

对线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，其中 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbf{R}^{n\times n}$ 为非奇异矩阵，可变换成

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Bx}+\boldsymbol{f} \tag{6.1}$$

的形式，从而构造出一阶定常迭代法公式

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{Bx}^{(k)}+\boldsymbol{f},\quad k=0,1,2,\cdots \tag{6.2}$$

其中 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 为任取的初始向量，$\boldsymbol{B}$ 为常数矩阵，称为迭代矩阵，$\boldsymbol{f}$ 为常数向量.

若 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)}$ 存在（记为 $\boldsymbol{x}^*$），则称此迭代法收敛，且 $\boldsymbol{x}^*$ 就是方程组的解，否则称此迭代法发散.

定理 6.1（迭代法基本定理） 对任意初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$，一阶定常迭代法(6.2)收敛的充要条件是迭代矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的谱半径 $\rho(\boldsymbol{B})<1$.

定理 6.2（迭代法收敛的充分条件） 若迭代矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的某种算子范数 $\|\boldsymbol{B}\|=q<1$，则一阶定常迭代法(6.2)对任意初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 都收敛.

定义 6.1 称 $R(\boldsymbol{B})=-\ln\rho(\boldsymbol{B})$ 为迭代法(6.2)的渐近收敛速度，简称迭代法收敛速度.

1.1.2 雅可比迭代法

若 $a_{ii}\neq 0(i=1,2,\cdots,n)$，则可取

$$\boldsymbol{B}_J=\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}),\quad \boldsymbol{f}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b} \tag{6.3}$$

其中 $\boldsymbol{D}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的对角线元素构成的对角矩阵，$\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{U}$ 分别为 $\boldsymbol{A}$ 的对角线以下及以上部分元素的反号数构成的矩阵. 这样构造出的迭代法称为雅可比迭代法，其用分量表示的计算公式为

$$x_i^{(k+1)} = \frac{b_i - \sum\limits_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{6.4}$$

定理 6.3 雅可比迭代法收敛的充要条件是 $\rho(\boldsymbol{B}_J) < 1$.

定理 6.4 若 $\|\boldsymbol{B}_J\|_1 < 1$ 或 $\|\boldsymbol{B}_J\|_\infty < 1$ 或 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优矩阵,或 $\boldsymbol{A}$ 为弱对角占优且不可约矩阵,则雅可比迭代法收敛.

1.1.3 高斯-塞德尔迭代法

类似于雅可比迭代法,取

$$\boldsymbol{B}_s = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}, \quad \boldsymbol{f} = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b} \tag{6.5}$$

这样构造出的迭代法称为高斯-塞德尔迭代法,其用分量表示的计算公式为

$$x_i^{(k+1)} = \frac{b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{6.6}$$

定理 6.5 高斯-塞德尔迭代法收敛的充要条件是 $\rho(\boldsymbol{B}_s) < 1$.

定理 6.6 若 $\|\boldsymbol{B}_s\|_1 < 1$ 或 $\|\boldsymbol{B}_s\|_\infty < 1$,或 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优矩阵,或 $\boldsymbol{A}$ 为弱对角占优且不可约矩阵,则高斯-塞德尔迭代法收敛.

1.1.4 解大型稀疏线性方程组的逐次超松弛迭代法(SOR 法)

对高斯-塞德尔迭代法作修正,取迭代矩阵为

$$\boldsymbol{L}_w = (\boldsymbol{D} - w\boldsymbol{L})^{-1}((1-w)\boldsymbol{D} + w\boldsymbol{U}), \quad \boldsymbol{f} = w(\boldsymbol{D} - w\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b} \tag{6.7}$$

其中 w 为松弛因子. 这样构造的迭代法称为逐次超松弛迭代法(SOR 法). 该方法的松弛因子 ω 可根据收敛速度选取最佳的 w_{opt}. SOR 法用分量表示的计算公式为

$$x_i^{(k+1)} = (1-w)x_i^{(k)} + \frac{w}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}\right), \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{6.8}$$

定理 6.7 SOR 迭代法收敛的充要条件是 $\rho(\boldsymbol{L}_w) < 1$.

定理 6.8 若 $\|\boldsymbol{L}_w\|_1 < 1$ 或 $\|\boldsymbol{L}_w\|_\infty < 1$,或 $\boldsymbol{A}$ 对称正定且 $0 < w < 2$,或 $\boldsymbol{A}$ 严格对角占优且 $0 < w \leqslant 1$,或 $\boldsymbol{A}$ 弱对角占优且不可约且 $0 < w \leqslant 1$,则 SOR 迭代法收敛.

定理 6.9 SOR 迭代法收敛的必要条件是 $0 < w < 2$.

1.1.5 分块迭代法

将系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 及右端向量 $\boldsymbol{b}$ 分块，可得块雅可比迭代法

$$\boldsymbol{A}_{ii}\boldsymbol{x}_i^{(k+1)} = \boldsymbol{b}_i - \sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{q}\boldsymbol{A}_{ij}\boldsymbol{x}_j^{(k)},\quad i=1,2,\cdots,q \tag{6.9}$$

块 SOR 迭代法(BSOR)

$$\boldsymbol{A}_{ii}\boldsymbol{x}_i^{(k+1)} = \boldsymbol{A}_{ii}\boldsymbol{x}_i^{(k)} + w\left(\boldsymbol{b}_i - \sum_{j=1}^{i-1}\boldsymbol{A}_{ij}\boldsymbol{x}_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{q}\boldsymbol{A}_{ij}\boldsymbol{x}_j^{(k)}\right),\quad i=1,2,\cdots,q \tag{6.10}$$

每步求解时都要解低阶方程组来求得小块 $\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}$.

定理 6.10 若 $\boldsymbol{A}$ 为对称正定矩阵，且 $0<w<2$，则 BSOR 迭代法收敛.

1.2 习题全解

1. 设方程组 $\begin{cases}5x_1+2x_2+x_3=-12\\-x_1+4x_2+2x_3=20\\2x_1-3x_2+10x_3=3\end{cases}$

(1) 考察用雅可比迭代法、高斯-塞德尔迭代法解此方程组的收敛性；

(2) 用雅可比迭代法及高斯-塞德尔迭代法解此方程组，要求当 $\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty<10^{-5}$ 时迭代终止.

解 (1) 因为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 严格对角占优，故雅可比迭代法与高斯-塞德尔迭代法均收敛.

(2) 雅可比法的迭代格式为

$$\begin{cases}x_1^{(k+1)} = & -\frac{2}{5}x_2^{(k)}-\frac{1}{5}x_3^{(k)}-\frac{12}{5}\\x_2^{(k+1)} = \frac{1}{4}x_1^{(k)} & -\frac{1}{2}x_3^{(k)}+5\\x_3^{(k+1)} = -\frac{1}{5}x_1^{(k)}+\frac{3}{10}x_2^{(k)} & +\frac{3}{10}\end{cases}$$

取 $\boldsymbol{x}^{(0)}=(1,1,1)^{\mathrm{T}}$，迭代到 17 次达到精度要求

$$\boldsymbol{x}^{(17)}=(-4.000\,018\,6,\ 2.999\,991\,5,\ 2.000\,001\,2)^{\mathrm{T}}$$

高斯-塞德尔法的迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = & & -\frac{2}{5}x_2^{(k)} - \frac{1}{5}x_3^{(k)} - \frac{12}{5} \\ x_2^{(k+1)} = & \frac{1}{4}x_1^{(k+1)} & -\frac{1}{2}x_3^{(k)} + 5 \\ x_3^{(k+1)} = & -\frac{1}{5}x_1^{(k+1)} - \frac{3}{10}x_2^{(k+1)} & + \frac{3}{10} \end{cases}$$

取 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (1, 1, 1)^T$，迭代到8次达到精度要求

$$\boldsymbol{x}^{(8)} = (-4.000\,018\,6,\ 2.999\,991\,5,\ 2.000\,001\,2)^T$$

2. 设方程组

$$(1)\begin{cases} x_1 + 0.4x_2 + 0.4x_3 = 1 \\ 0.4x_1 + x_2 + 0.8x_3 = 2, \\ 0.4x_1 + 0.8x_2 + x_3 = 3 \end{cases} \quad (2)\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}.$$

试考察解此方程组的雅可比迭代法及高斯-塞德尔迭代法的收敛性.

解　(1) 雅可比法的迭代矩阵

$$\boldsymbol{B}_J = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}) = \begin{bmatrix} 0 & -0.4 & -0.4 \\ -0.4 & 0 & -0.8 \\ -0.4 & -0.8 & 0 \end{bmatrix}$$

$$|\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}_J| = (\lambda - 0.8)(\lambda^2 + 0.8\lambda - 0.32)$$

$\rho(\boldsymbol{B}_J) = 1.093 > 1$，故雅可比迭代法不收敛.

高斯-塞德尔法迭代矩阵

$$\boldsymbol{B}_s = (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 0 & -0.4 & -0.4 \\ 0 & 0.16 & -0.64 \\ 0 & 0.032 & 0.672 \end{bmatrix}$$

$$\rho(\boldsymbol{B}_s) = \|\boldsymbol{B}_s\|_{\infty} = 0.8 < 1$$

故高斯-塞德尔迭代法收敛.

(2) 雅可比法的迭代矩阵

$$\boldsymbol{B}_J = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}) = \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ -1 & 0 & -1 \\ -2 & -2 & 0 \end{bmatrix}$$

$$|\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}_J| = \lambda^3, \quad \rho(\boldsymbol{B}_J) = 0 < 1$$

故雅可比迭代法收敛.

高斯-塞德尔法的迭代矩阵

$$B_s = (D - L)^{-1}U = \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

$$|\lambda I - B_s| = \lambda(\lambda - 2)^2, \quad \rho(B_s) = 2 > 1$$

故高斯-塞德尔迭代法不收敛.

3. 求证 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = A$ 的充要条件是对任何向量 x,都有 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k x = Ax$.

证明　必要条件　由 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = A$,知 $\lim\limits_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}$,从而有 $\|A_k - A\| \to 0$ $(k\to\infty)$. 故对 $\forall x$,有

$$\|A_k x - Ax\| \leqslant \|A_k - A\| \|x\| \to 0 \quad (k\to\infty)$$

即 $A_k x \to Ax$, $\lim\limits_{k\to\infty} A_k x = Ax$.

充分条件　对 $\forall x \in \mathbf{R}^n$,有 $A_k x \to Ax (k\to\infty)$,取 $x_i = (0, \cdots, 0, \underset{i}{1}, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$

$$A_k x_i = (a_{1i}^{(k)}, a_{2i}^{(k)}, \cdots, a_{ni}^{(k)})^{\mathrm{T}} \to Ax_i \quad (k\to\infty)$$

$$Ax_i = (a_{1i}, a_{2i}, \cdots, a_{ni})^{\mathrm{T}}$$

故

$$a_{ji}^{(k)} \to a_{ji} \quad (i, j = 1, 2, \cdots, n)$$

即 $A_k \to A$, $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = A$.

4. 设 $Ax = b$,其中 A 对称正定,问解此方程组的雅可比迭代法是否一定收敛?试考察习题 2(1) 方程组.

解　不一定,因矩阵的谱半径 $\rho(B_J)$ 无法确定是否小于 1.

对习题 2(1),A 对称,又 $\Delta_1 = 1 > 0$,$\Delta_2 = 0.84 > 0$,$\Delta_3 = |A| = 0.296 > 0$,故 A 正定,但其雅可比迭代法不收敛.

5. 用 SOR 方法解方程组 $\begin{cases} 4x_1 - x_2 = 1 \\ -x_1 + 4x_2 - x_3 = 4 \\ -x_2 + 4x_3 = -3 \end{cases}$ (分别取松弛因子 $w = 1.03$, $w = 1$, $w = 1.1$),精确解 $x^* = \left(\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right)^{\mathrm{T}}$,$\|x^* - x^{(k)}\|_\infty \leqslant 5\times 10^{-6}$ 时迭代终止,并且对每一个 ω 值确定迭代次数.

解　SOR 方法的迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - w\left(\dfrac{1}{4} - x_1^{(k)} + \dfrac{1}{4}x_2^{(k)}\right) \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} + w\left(1 + \dfrac{1}{4}x_1^{(k+1)} - x_2^{(k)} + \dfrac{1}{4}x_3^{(k)}\right) \\ x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} - w\left(-\dfrac{3}{4} + \dfrac{1}{4}x_2^{(k+1)} - x_3^{(k)}\right) \end{cases}$$

当取 $w=1.03$，初值 $\boldsymbol{x}^{(0)}=(0,0,0)^{T}$ 时，迭代 5 次达到精度要求，$\boldsymbol{x}^{(5)}=(0.500\,004\,4, 1.000\,001\,6, -0.499\,999\,7)^{T}$.

当取 $w=1$，初值 $\boldsymbol{x}^{(0)}=(0,0,0)^{T}$ 时，迭代 6 次达到精度要求，$\boldsymbol{x}^{(6)}=(0.500\,003\,8, 1.000\,001\,9, -0.499\,999\,5)^{T}$.

当取 $w=1.1$，初值 $\boldsymbol{x}^{(0)}=(0,0,0)^{T}$ 时，迭代 6 次达到精度要求，$\boldsymbol{x}^{(6)}=(0.500\,003\,6, 0.999\,998\,5, -0.500\,000\,0)^{T}$.

6. 用 SOR 方法解方程组（取 $w=0.9$）$\begin{cases}5x_1+2x_2+x_3=-12\\-x_1+4x_2+2x_3=20\\2x_1-3x_2+10x_3=3\end{cases}$，要求当 $\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty<10^{-4}$ 时迭代终止.

解　SOR 迭代格式为

$$\begin{cases}x_1^{(k+1)}=x_1^{(k)}+w\left(-\dfrac{12}{5}-x_1^{(k)}-\dfrac{2}{5}x_2^{(k)}-\dfrac{1}{5}x_3^{(k)}\right)\\x_2^{(k+1)}=x_2^{(k)}+w\left(5+\dfrac{1}{4}x_1^{(k+1)}-x_2^{(k)}-\dfrac{1}{2}x_3^{(k)}\right)\\x_3^{(k+1)}=x_3^{(k)}+w\left(\dfrac{3}{10}-\dfrac{1}{5}x_1^{(k+1)}+\dfrac{3}{10}x_2^{(k+1)}-x_3^{(k)}\right)\end{cases}$$

取初始值 $\boldsymbol{x}^{(0)}=(1,1,1)^{T}$，计算如下表所示：

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	0	0	0
1	−2.600 000 0	3.565 000 0	1.800 550 0
2	−4.027 499 0	3.140 065 2	2.022 822 4
3	−4.057 281 4	2.990 848 1	2.010 121 9
4	−4.004 255 4	2.993 572 5	2.000 042 7
5	−3.998 119 3	2.999 761 2	1.999 601 3
6	−3.999 654 2	3.000 233 4	1.999 960 9
7	−4.000 042 4	3.000 031 4	2.000 012 2
8	−4.000 017 7	2.999 993 7	2.000 002 7

因 $\|\boldsymbol{x}^{(8)}-\boldsymbol{x}^{(7)}\|_\infty=0.000\,037\,7<10^{-4}$，故取 $\boldsymbol{x}^{(8)}=(-4.000\,017\,7, 2.999\,993\,7, 2.000\,002\,7)^{T}$.

7. 设有方程组 $Ax = b$，其中 A 为对称正定阵，迭代公式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + w(b - Ax^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

试证明当 $0 < w < \frac{2}{\beta}$ 时上述迭代法收敛（其中 $0 < \alpha \leqslant \lambda(A) \leqslant \beta$）.

证明 迭代格式要改写为

$$x^{(k+1)} = (I - wA)x^{(k)} + wb, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

故迭代矩阵 $B = I - wA$，其特征值 $\mu = 1 - w\lambda(A)$.

由 $|\mu| < 1$，$|1 - w\lambda(A)| < 1$ 得

$$0 < w < \frac{2}{\lambda(A)}$$

故当 $0 < w < \frac{2}{\beta}$ 时，有 $0 < w < \frac{2}{\lambda(A)}$，从而有 $|\mu| < 1$，$\rho(B) < 1$，给出的迭代格式收敛.

8. 证明矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & a & a \\ a & 1 & a \\ a & a & 1 \end{bmatrix}$$

对于 $-\frac{1}{2} < a < 1$ 是正定的，而雅可比迭代只对 $-\frac{1}{2} < a < \frac{1}{2}$ 是收敛的.

证明 当 $-\frac{1}{2} < a < 1$ 时，由

$$\det\begin{bmatrix} 1 & a \\ a & 1 \end{bmatrix} = 1 - a^2 > 0, \quad \det(A) = (1 - a)^2(1 + 2a) > 0$$

故 A 是正定的. 又雅可比法迭代矩阵

$$B_J = \begin{bmatrix} 0 & -a & -a \\ -a & 0 & -a \\ -a & -a & 0 \end{bmatrix}$$

$$\det(\lambda I - B_J) = \begin{vmatrix} \lambda & a & a \\ a & \lambda & a \\ a & a & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^3 - 3\lambda a^2 + 2a^3 = (\lambda - a)^2(\lambda + 2a)$$

故 $\rho(B_J) = |2a|$，即只有 $-\frac{1}{2} < a < \frac{1}{2}$ 时，雅可比迭代法收敛.

9. 给定迭代过程 $x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + g$，其中 $G \in \mathbf{R}^{n\times n}(k = 0, 1, 2, \cdots)$，试证明：如果 G 的特征值 $\lambda_i(G) = 0(i = 1, 2, \cdots, n)$，则此迭代过程最多迭代 n 次收

敛于方程组的解.

证明　由矩阵 G 的若当标准形 J,存在可逆阵 P 使

$$G = P^{-1}JP$$

由于 G 的特征值全为零,故 J 一定有如下形式:

$$J = \begin{bmatrix} J_1 & & & \\ & J_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & J_r \end{bmatrix},\quad J_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & \\ & 0 & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & 0 \end{bmatrix}_{n_i \times n_i},\quad \sum_{i=1}^{r} n_i = n$$

方程组 $x = Gx + g$ 等价于 $(I-G)x = g$,由于 $\lambda(G) = 0$,故 $\lambda(I-G) = 1 - \lambda(G) = 1 \neq 0$,从而 $I-G$ 非奇异,即 $(I-G)x = g$ 有唯一解 x^*. 于是

$$x^* = Gx^* + g$$

与所述迭代格式相减,有

$$x^{(k+1)} - x^* = G(x^{(k)} - x^*)$$

故
$$x^{(n)} - x^* = G^n(x^{(0)} - x^*)$$

又
$$G^n = P^{-1}J^nP = 0$$

故
$$x^{(n)} - x^* = 0,\quad 即\quad x^{(n)} = x^*$$

因此,任取 $x^{(0)}$,至多迭代 n 次即可收敛到方程组的解.

10. 设 A 为严格对角占优阵,且 $0 < w \leqslant 1$. 求证解 $Ax = b$ 的 SOR 迭代法收敛.

证明　因 A 严格对角占优,故 $a_{ii} \neq 0 (i = 1, 2, \cdots, n)$,且 A 非奇异.

利用 SOR 迭代法

$$L_w = (D - wL)^{-1}((1-w)D + wU)$$

其中 $A = D - L - U$,而 D, $-L$, $-U$ 分别为 A 的对角、严格下三角与严格上三角. 只需证明 $0 < w \leqslant 1$ 时,$\rho(L_w) < 1$ 即有结论成立.

用反证法　设 L_w 有一个特征值 λ 满足 $|\lambda| \geqslant 1$,则有

$$\det(\lambda I - L_w) = 0$$

从而有

$$\det\left\{(D-wL)^{-1}\left[(D-wL) - \frac{1}{\lambda}((1-w)D + wU)\right]\right\} = 0$$

即
$$\det(D-wL)^{-1} \cdot \det\left[\left(1 - \frac{1}{\lambda}(1-w)\right)D - wL - \frac{w}{\lambda}U\right] = 0$$

因 A 严格对角占优,故 $\det(D - wL)^{-1} \neq 0$.

令 $C=\left(1-\frac{1}{\lambda}(1-w)\right)D-wL-\frac{w}{\lambda}U$，则

$$|C_{ii}|=\left|1-\frac{1}{\lambda}(1-w)\right||a_{ii}|\geqslant\left[1-\frac{1}{|\lambda|}(1-w)\right]|a_{ii}|\geqslant$$

$$w|a_{ii}|>w\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n}|a_{ij}|\geqslant w\sum_{j=1}^{i-1}|a_{ij}|+\frac{w}{|\lambda|}\sum_{j=i+1}^{n}|a_{ij}|$$

$$i=1,2,\cdots,n$$

这表明 C 在 $0<w\leqslant 1$ 时也严格对角占优，故 $\det C\neq 0$. 这与 $\det(\lambda I-L_w)=0$，矛盾，故假设不成立，从而 $|\lambda|<1$，即 $\rho(L_w)<1$，SOR 迭代法收敛.

第 7 章　非线性方程求根

1.1　重点、难点全析

1.1.1　问题简介

求单变量非线性方程

$$f(x) = 0 \tag{7.1}$$

的根是指求 x^*（实数或复数），使得 $f(x^*) = 0$. 称 x^* 为方程(7.1)的根，也称 x^* 为函数 $f(x)$ 的零点．若 $f(x)$ 可以分解为

$$f(x) = (x - x^*)^m g(x)$$

其中 m 为正整数，且 $g(x^*) \neq 0$，则 x^* 是方程(7.1)的根．当 $m = 1$ 时，称 x^* 为单根；当 $m > 1$ 时，称 x^* 为 m 重根．若 $g(x)$ 充分光滑，x^* 是方程(7.1)的 m 重根，则有

$$f(x^*) = f'(x^*) = \cdots = f^{(m-1)}(x^*) = 0, \quad f^{(m)}(x^*) \neq 0$$

若 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续且 $f(a)f(b) < 0$，则方程(7.1)在 (a, b) 内至少有一个实根，称 $[a, b]$ 为方程(7.1)的有根区间．可通过函数作图法或逐次搜索法求得有根区间．

1.1.2　方程求根的几种常用方法

1. 二分法

设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续，$f(a)f(b) < 0$，则 $f(x) = 0$ 在 (a, b) 内有根 x^*．再设 $f(x) = 0$ 在 (a, b) 内仅有一个根．令 $a_0 = a$，$b_0 = b$，计算 $x_0 = \frac{1}{2}(a_0 + b_0)$ 和 $f(x_0)$．若 $f(x_0) = 0$，则 $x^* = x_0$，结束计算；若 $f(a_0)f(x_0) > 0$，则令 $a_1 = x_0$，$b_1 = b$，得新的有根区间 $[a_1, b_1]$；若 $f(a_0)f(x_0) < 0$，则令 $a_1 = a_0$，$b_1 = x_0$，得新的有根区间 $[a_1, b_1]$．$[a_1, b_1] \subset [a_0, b_0]$，$b_1 - a_1 = \frac{1}{2}(b_0 - a_0)$．再令

$x_1 = \frac{1}{2}(a_1 + b_1)$，计算 $f(x_1)$，同上法得出新的有根区间 $[a_2, b_2]$．如此反复进行，可得一有根区间套

$$\cdots \subset [a_n, b_n] \subset [a_{n-1}, b_{n-1}] \subset \cdots \subset [a_0, b_0]$$

且 $a_n < x^* < b_n$，$n = 0, 1, 2, \cdots$，$b_n - a_n = \frac{1}{2}(b_{n-1} - a_{n-1}) = \cdots = \frac{1}{2^n}(b_0 - a_0)$．故

$$\lim_{n\to\infty}(b_n - a_n) = 0, \quad \lim_{n\to\infty} x_n = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2}(a_n + b_n) = x^*$$

因此，$x_n = \frac{1}{2}(a_n + b_n)$ 可作为 $f(x) = 0$ 的近似根，且有误差估计

$$|x_n - x^*| \leqslant \frac{1}{2^{n+1}}(b - a) \tag{7.2}$$

2. 迭代法

将方程式(7.1)等价变形为

$$x = \varphi(x) \tag{7.3}$$

若要求 x^* 满足 $f(x^*) = 0$，则 $x^* = \varphi(x^*)$；反之亦然．称 x^* 为函数 $\varphi(x)$ 的一个**不动点**．求 $f(x)$ 的根等价于求 $\varphi(x)$ 的不动点．由式(7.3)产生的不动点迭代关系式（也称简单迭代法）为

$$x_{k+1} = \varphi(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \cdots \tag{7.4}$$

函数 $\varphi(x)$ 称为迭代函数．如果对任何 $x_0 \in [a, b]$，由式(7.4)产生的序列 $\{x_k\}$ 有极限

$$\lim_{k\to\infty} x_k = x^*$$

则称迭代方程(7.4)收敛．

定理 7.1（不动点存在性定理）　设 $\varphi(x) \in C[a, b]$ 满足以下两个条件：

1° 对任意 $x \in [a, b]$ 有 $a \leqslant \varphi(x) \leqslant b$；

2° 存在正常数 $L < 1$，使对任意 $x, y \in [a, b]$，都有

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leqslant L|x - y| \tag{7.5}$$

则 $\varphi(x)$ 在 $[a, b]$ 上存在唯一的不动点 x^*．

定理 7.2（不动点迭代法的全局收敛性定理）　设 $\varphi(x) \in C[a, b]$ 满足定理 7.1 中的两个条件，则对任意 $x_0 \in [a, b]$，由式(7.4)得到的迭代序列 $\{x_k\}$ 收敛到 $\varphi(x)$ 的不动点，并有误差估计式

$$|x_k - x^*| \leqslant \frac{L}{1 - L}|x_k - x_{k-1}| \tag{7.6}$$

和
$$|x_k - x^*| \leqslant \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0| \tag{7.7}$$

定理 7.3（不动点迭代法的局部收敛性定理）　设为 $\varphi(x)$ 有不动点 x^*，$\varphi'(x)$ 在 x^* 的某个邻域连续，且 $|\varphi'(x)| < 1$，则迭代法(7.4) 局部收敛．

收敛阶的概念　设迭代过程 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 收敛于方程 $x = \varphi(x)$ 的根 x^*，如果迭代误差 $e_k = x_k - x^*$ 当 $k \to \infty$ 时成立下列渐近关系式

$$\frac{e_{k+1}}{e_k^p} \to C \quad (\text{常数 } C \neq 0) \tag{7.8}$$

则称该迭代过程是 **p 阶收敛**的．特别地，$p = 1$ 时称线性收敛，$p > 1$ 时称超线性收敛，$p = 2$ 时称平方收敛．

定理 7.4（收敛阶定理）　对于迭代过程 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$，如果 $\varphi^{(p)}(x)$ 在所求根 x^* 的邻近连续，并且

$$\left.\begin{array}{l} \varphi'(x^*) = \varphi''(x^*) = \cdots = \varphi^{(p-1)}(x^*) = 0 \\ \varphi^{(p)}(x^*) \neq 0 \end{array}\right\} \tag{7.9}$$

则该迭代过程在点 x^* 的邻近是 p 阶收敛的，并有

$$\lim_{k\to\infty} \frac{e_{k+1}}{e_k^p} = \frac{1}{p!}\varphi^{(p)}(x^*) \tag{7.10}$$

斯蒂芬森(Steffensen)迭代法　当不动点迭代法(7.4) 只有线性收敛阶，甚至于不收敛时，可用斯蒂芬森迭代法进行加速．具体公式为

$$\left.\begin{array}{l} y_k = \varphi(x_k), \quad z_k = \varphi(y_k) \\ x_{k+1} = x_k - \dfrac{(y_k - x_k)^2}{z_k - 2y_k + x_k} \end{array}\right\}, k = 0, 1, 2, \cdots \tag{7.11}$$

此法也可写成如下不动点迭代式：

$$\left.\begin{array}{l} x_{k+1} = \psi(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \cdots \\ \psi(x) = x - \dfrac{[\varphi(x) - x]^2}{\varphi(\varphi(x)) - 2\varphi(x) + x} \end{array}\right\} \tag{7.12}$$

定理 7.5（斯蒂芬森迭代收敛性定理）　设 x^* 为式(7.12) 中迭代函数 $\psi(x)$ 的不动点，则 x^* 为 $\varphi(x)$ 的不动点；设 $\varphi''(x)$ 存在，$\varphi'(x^*) \neq 1$，则 x^* 是 $\psi(x)$ 的不动点，且斯蒂芬森迭代法(7.11) 是 2 阶收敛的．

3．牛顿迭代法

牛顿迭代法是一种特殊的不动点迭代法，其计算公式为

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots \tag{7.13}$$

其迭代函数为

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

牛顿迭代法的收敛速度 当 $f(x^*) = 0$，$f'(x^*) \neq 0$，$f''(x^*) \neq 0$ 时，容易证明，$\varphi'(x^*) = 0$，$\varphi''(x^*) = \dfrac{f''(x^*)}{f'(x^*)} \neq 0$，由定理 7.4 知，牛顿迭代法是平方收敛的，且

$$\lim_{k\to\infty} \frac{x_{k+1} - x^*}{(x_k - x^*)^2} = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \tag{7.14}$$

重根情形的牛顿迭代法 当 x^* 是 $f(x) = 0$ 的 m 重根($m \geqslant 2$)时，迭代函数 $\varphi(x) = x - \dfrac{f(x)}{f'(x)}$ 在 x^* 处的导数 $\varphi'(x^*) = 1 - \dfrac{1}{m} \neq 0$，且 $|\varphi'(x^*)| < 1$．所以牛顿迭代法求重根只是线性收敛．若 x^* 的重数 m 知道，则迭代式

$$x_{k+1} = x_k - m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots \tag{7.15}$$

求重根二阶收敛．当 m 未知时，x^* 一定是函数 $\mu(x) = \dfrac{f(x)}{f'(x)}$ 的单重零点，此时迭代式

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\mu(x_k)}{\mu'(x_k)} = x_k - \frac{f(x_k)f'(x_k)}{[f'(x_k)]^2 - f(x_k)f''(x_k)}$$

$$k = 0, 1, 2, \cdots \tag{7.16}$$

也是二阶收敛的．

简化牛顿法 如下迭代法：

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

称为简化牛顿法或平行弦法．

牛顿下山法 为防止迭代不收敛，可采用牛顿下山法．

4．弦截法

将牛顿迭代法(7.13)中的 $f'(x_k)$ 用 $f(x)$ 在 x_{k-1}，x_k 处的一阶差商来代替，即可得弦截法

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1}) \tag{7.17}$$

定理 7.6 假设 $f(x)$ 在其零点 x^* 的邻域 Δ：$|x - x^*| \leqslant \delta$ 内具有二阶连续导数，且对任意 $x \in \Delta$ 有 $f'(x) \neq 0$，又初值 x_0，$x_1 \in \Delta$，则当邻域 Δ 充分小

时，弦截法(7.17)将按阶 $p=\frac{1+\sqrt{5}}{2}\approx 1.618$ 收敛到 x^*. 这里 p 是方程 $\lambda^2-\lambda-1=0$ 的正根.

5. 抛物线法

弦截法可以理解为用过 $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$, $(x_k, f(x_k))$ 两点的直线方程的根近似代替 $f(x)=0$ 的根. 若已知 $f(x)=0$ 的三个近似根 x_k, x_{k-1}, x_{k-2}，用过 $(x_k, f(x_k))$, $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$, $(x_{k-2}, f(x_{k-2}))$ 的抛物线方程的根近似代替 $f(x)=0$ 的根，所得的迭代法称为抛物线法，也称密勒(Müller)法.

当 $f(x)$ 在 x^* 的邻近有三阶连续导数，$f'(x^*)\neq 0$，则抛物线法局部收敛，且收敛阶为 $p=1.839\approx 1.84$.

1.2　习题全解

1. 用二分法求方程 $x^2-x-1=0$ 的正根，要求误差小于 0.05.

解　令 $f(x)=x^2-x-1$，则有 $f(1)=-1<0$，$f(2)=1>0$，故 $[1,2]$ 为函数 $f(x)$ 的有根区间. 又 $f'(x)=2x-1$，故当 $0<x<\frac{1}{2}$ 时，$f(x)$ 单减，当 $x>\frac{1}{2}$ 时 $f(x)$ 单增. 而 $f\left(\frac{1}{2}\right)=-\frac{5}{4}$，$f(0)=-1$，由单调性知 $f(x)=0$ 的唯一正根 $x^*\in(1,2)$. 根据二分法的误差估计式(7.2)知，要求误差小于 0.05，只需 $\frac{1}{2^{k+1}}<0.05$，解得 $k+1>5.322$，故至少应二分 6 次. 具体计算结果见下表：

k	a_k	b_k	x_k	$f(x_k)$ 的符号
0	1	2	1.5	−
1	1.5	2	1.75	+
2	1.5	1.75	1.625	+
3	1.5	1.625	1.562 5	−
4	1.562 5	1.625	1.593 75	−
5	1.593 75	1.625	1.609 375	−

即 $x^*\approx x_5=1.609\ 375$.

2. 为求方程 $x^3-x^2-1=0$ 在 $x_0=1.5$ 附近的一个根，设将方程改写成下列等价形式，并建立相应的迭代公式：

(1) $x=1+\dfrac{1}{x^2}$，迭代公式 $x_{k+1}=1+\dfrac{1}{x_k^2}$；

(2) $x^3=1+x^2$，迭代公式 $x_{k+1}=\sqrt[3]{1+x_k^2}$；

(3) $x^2=\dfrac{1}{x-1}$，迭代公式 $x_{k+1}=\dfrac{1}{\sqrt{x_k-1}}$.

试分析每种迭代公式的收敛性，并选取一种公式求出具有四位有效数字的近似根．

解 取 $x_0=1.5$ 的邻域[1.3, 1.6]来考察．

(1) 当 $x\in[1.3,1.6]$ 时，$\varphi(x)=1+\dfrac{1}{x^2}\in[1.3,1.6]$，$|\varphi'(x)|=\left|-\dfrac{2}{x^3}\right|\leqslant\dfrac{2}{1.3^3}=L<1$，故迭代式 $x_{k+1}=1+\dfrac{1}{x_k^2}$ 在[1.3, 1.6]上整体收敛．

(2) 当 $x\in[1.3,1.6]$ 时，

$$\varphi(x)=(1+x^2)^{1/3}\in[1.3,1.6]$$

$$|\varphi'(x)|=\frac{2}{3}\left|\frac{x}{(1+x^2)^{\frac{2}{3}}}\right|<\frac{2}{3}\,\frac{1.6}{(1+1.3^2)^{\frac{2}{3}}}\leqslant L=0.522<1$$

故 $x_{k+1}=\sqrt[3]{1+x_k^2}$ 在[1.3, 1.6]上整体收敛．

(3) $\varphi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{x-1}}$，$|\varphi'(x)|=\left|\dfrac{-1}{2(x-1)^{3/2}}\right|>\dfrac{1}{2(1.6-1)}>1$，故 $x_{k+1}=\dfrac{1}{\sqrt{x_k-1}}$ 发散．

因为迭代公式(2)的 L 较小，故取公式(2)进行迭代．要求结果具有四位有效数字，只需

$$|x_k-x^*|\leqslant\frac{L}{1-L}|x_k-x_{k-1}|<\frac{1}{2}\times10^{-3}$$

即

$$|x_k-x_{k-1}|<\frac{1-L}{L}\times\frac{1}{2}\times10^{-3}<0.5\times10^{-3}$$

取 $x_0=1.5$ 计算结果见下表：

k	x_k	k	x_k
1	1.481 248 034	4	1.467 047 973
2	1.472 705 730	5	1.466 243 010
3	1.468 817 314	6	1.465 876 820

由于 $|x_5 - x_6| < \frac{1}{2} \times 10^{-3}$,故可取 $x^* \approx x_6 = 1.466$.

3. 比较求 $e^x + 10x - 2 = 0$ 的根到三位小数所需的计算量:

(1) 在区间[0, 1]内用二分法;

(2) 用迭代法 $x_{k+1} = \frac{2 - e^{x_k}}{10}$,取初值 $x_0 = 0$.

解　(1) 因 $x^* \in [0, 1]$, $f(0) = -1 < 0$, $f(1) = 10.7183 > 0$, 故 $0 < x^* < 1$,用二分法计算结果见下表:

k	a_k	b_k	x_k	$f(x_k)$ 的符号	$\frac{1}{2^{k+1}}$
0	0	1	0.5	+	0.5
1	0	0.5	0.25	+	0.25
2	0	0.25	0.125	+	0.125
3	0	0.125	0.062 5	[illegible]	0.062 5
4	0.062 5	0.125	0.093 75	+	0.031 25
5	0.062 5	0.093 75	0.078 125	−	0.015 625
6	0.078 125	0.093 75	0.085 937 5	−	0.007 812 5
7	0.085 937 5	0.093 75	0.089 843 75	−	0.003 906 25
8	0.089 843 75	0.093 75	0.091 796 875	+	0.001 953 125
9	0.089 843 75	0.091 796 875	0.090 820 312	+	0.000 976 562
10	0.089 843 75	0.090 820 312	0.090 332 031	−	0.000 488 281
11	0.090 332 031	0.090 820 312	0.090 576 171	+	0.000 244 14
12	0.090 332 031	0.090 576 171	0.090 454 101	−	0.000 122 07
13	0.090 454 101	0.090 576 171	0.090515 136	−	0.000 061 035
14	0.090 515 136	0.090 576 171	0.090 545 653	+	0.000 030 517

二分法迭代 14 次后满足精度要求，$|x_{14}-x^*|\leqslant\frac{1}{2^{15}}=0.000\ 030\ 517<\frac{1}{2}\times 10^{-4}$，$x^*\approx x_{14}$ 具有三位有效数字．

(2) 当 $x\in[0,0.5]$ 时，$\varphi(x)\in[0,0.5]$，$|\varphi'(x)|=\frac{1}{10}|-e^x|\leqslant L=0.825$，故迭代式 $x_{k+1}=\frac{1}{10}(2-e^{x_k})$ 在$[0,0.5]$上整体收敛．取 $x_0=0$，迭代计算结果见下表：

k	x_k	k	x_k
1	0.1	4	0.090 512 616
2	0.089 482 908	5	0.090 526 468
3	0.090 639 135	6	0.090 524 951

迭代 6 次后满足精度要求 $|x_6-x^*|\leqslant\frac{L}{1-L}|x_6-x_5|\leqslant 0.000\ 007\ 20<\frac{1}{2}\times 10^{-4}$，故 $x^*\approx x_6$ 精确到三位小数．

4. 给定函数 $f(x)$，设对一切 x，$f'(x)$ 存在且 $0<m\leqslant f'(x)\leqslant M$，证明对于范围 $0<\lambda<\frac{2}{M}$ 内的任意定数λ，迭代过程 $x_{k+1}=x_k-\lambda f(x_k)$ 均收敛于 $f(x)=0$ 的根 x^*．

证明 由于 $f'(x)>0$，$f(x)$ 为单增函数，故方程 $f(x)=0$ 的根 x^* 是唯一存在的（假定方程有根 x^*）．迭代函数 $\varphi(x)=x-\lambda f(x)$，$|\varphi'(x)|=|1-\lambda f'(x)|$．由 $0<m\leqslant f'(x)\leqslant M$ 及 $0<\lambda<\frac{2}{M}$ 得，$0<\lambda m\leqslant\lambda f'(x)\leqslant\lambda M<2$，$-1<1-\lambda M\leqslant 1-\lambda f'(x)\leqslant 1-\lambda m<1$，故 $|\varphi'(x)|\leqslant L=\max\{|1-\lambda m|,|1-\lambda M|\}<1$．由此可得

$$|x_k-x^*|\leqslant L|x_{k-1}-x^*|\leqslant\cdots\leqslant L^k|x_0-x^*|\to 0\ (k\to\infty)$$

即$\lim\limits_{k\to\infty}x_k=x^*$．

5. 用斯蒂芬森迭代法计算第 2 题中(2)，(3) 的近似根，精确到 10^{-5}．

解 记第 2 题中(2) 的迭代函数 $\varphi_2(x)=(1+x^2)^{\frac{1}{3}}$，(3) 的迭代函数为 $\varphi_3(x)=\frac{1}{\sqrt{x-1}}$，利用迭代式(7.11)，计算结果见下表：

k	加速 $\varphi_2(x)$ 的结果 x_k	k	加速 $\varphi_3(x)$ 的结果 x_k
0	1.5	0	1.5
1	1.465 558 485	1	1.467 342 286
2	1.465 571 233	2	1.465 576 085
3	1.465 571 232	3	1.465 571 232
		4	1.465 571 232

6. 设 $\varphi(x) = x - p(x)f(x) - q(x)f^2(x)$，试确定函数 $p(x)$ 和 $q(x)$，使求解 $f(x) = 0$ 且以 $\varphi(x)$ 为迭代函数的迭代法至少三阶收敛．

解　要求 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 三阶收敛到 $f(x) = 0$ 的根 x^*，应有 $\varphi(x^*) = x^*$，$\varphi'(x^*) = 0$，$\varphi''(x^*) = 0$．于是由

$$x^* = x^* - p(x^*)f(x^*) - q(x^*)f^2(x^*) = x^*$$

$$\varphi'(x^*) = 1 - p(x^*)f'(x^*) = 0$$

$$\varphi''(x^*) = -2p'(x^*)f'(x^*) - p(x^*)f''(x^*) - 2q(x^*)[f'(x^*)]^2 = 0$$

得
$$p(x^*) = \frac{1}{f'(x^*)},\quad q(x^*) = \frac{1}{2}\frac{f''(x^*)}{[f'(x^*)]^3}$$

故取

$$p(x) = \frac{1}{f'(x)},\quad q(x) = \frac{f''(x)}{2[f'(x)]^2}$$

即迭代至少三阶收敛．

7. 用下列方法求 $f(x) = x^3 - 3x - 1 = 0$ 在 $x_0 = 2$ 附近的根．根的准确值 $x^* = 1.879\,385\,24\cdots$，要求计算结果准确到四位有效数字．

(1) 用牛顿法；

(2) 用弦截法，取 $x_0 = 2$，$x_1 = 1.9$；

(3) 用抛物线法，取 $x_0 = 1$，$x_1 = 3$，$x_2 = 2$．

解　$f(1) = -3 < 0$，$f(2) = 1 > 0$，$f'(x) = 3x^2 - 3 = 3(x^2 - 1) \geqslant 0$，$f''(x) = 6x > 0$，对 $\forall x \in [1, 2]$．

(1) 取 $x_0 = 2$，用牛顿迭代法

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^3 - 3x_k - 1}{3x_k^2 - 3} = \frac{2x_k^3 + 1}{3(x_k^2 - 1)}$$

计算得 $x_1 = 1.888\,889$，$x_2 = 1.879\,452$，$|x_2 - x^*| < \frac{1}{2} \times 10^{-3}$，故 $x^* \approx x_2 = 1.879\,452$.

(2) 取 $x_0 = 2$，$x_1 = 1.9$，利用弦截法

$$x_{k+1} = x_k - \frac{(x_k - x_{k-1})f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

得 $x_2 = 1.981\,094$，$x_3 = 1.880\,841$，$x_4 = 1.879\,489$，$|x_4 - x^*| < \frac{1}{2} \times 10^{-3}$，故取 $x^* \approx x_4 = 1.879\,489$.

(3) $x_0 = 1$，$x_1 = 3$，$x_2 = 2$. 抛物线法的迭代式为

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k - \dfrac{2f(x_k)}{w + \operatorname{sign}(w)\sqrt{w^2 - 4f(x_k)f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}]}} \\ w = f[x_k, x_{k-1}] + f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}](x_k - x_{k-1}) \end{cases}$$

迭代结果为：$x_3 = 1.953\,968$，$x_4 = 1.878\,015$，$x_5 = 1.879\,387$ 已达四位有效数字.

8. 分别用二分法和牛顿法求 $x - \tan x = 0$ 的最小正根.

解　显然 $x^* = 0$ 满足 $x - \tan x = 0$. 另外当 $|x|$ 较小时，$\tan x \approx x + \frac{1}{3}x^3 + \cdots + \frac{x^{2k+1}}{2k+1} + \cdots$，故当 $x \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right)$ 时，$\tan x > x$，因此，方程 $x - \tan x = 0$ 的最小正根应在区间 $\left(\frac{\pi}{2}, \frac{3}{2}\pi\right)$ 内.

记 $f(x) = x - \tan x$，$x \in \left(\frac{\pi}{2}, \frac{3}{2}\pi\right)$，容易算得 $f(4) = 2.842\cdots > 0$，$f(4.6) = -4.26\cdots < 0$，因此 $[4, 4.6]$ 是 $f(x) = 0$ 的有根区间.

对于二分法，计算结果见下表：

k	a_k	b_k	x_k	$f(x_k)$ 的符号
0	4.0	4.6	4.3	+
1	4.3	4.6	4.45	+
2	4.45	4.6	4.525	−
3	4.45	4.525	4.487 5	+
4	4.487 5	4.525	4.506 25	[illegible]
5	4.487 5	4.506 25	4.496 875	−

续表

k	a_k	b_k	x_k	$f(x_k)$ 的符号
6	4.487 5	4.496 875	4.492 187 5	+
7	4.492 187 5	4.496 875	4.494 531 25	−
8	4.492 187 5	4.494 531 25	4.493 359 375	+
9	4.493 359 375	4.494 531 25	4.493 445 313	−

此时 $|x_9 - x^*| < \frac{1}{2^{10}} = \frac{1}{1\,024} < 10^{-3}$.

若用牛顿迭代法求解，由于 $f'(x) = 1 - \sec^2 x = -(\tan x)^2 < 0, f''(x) = -2\tan x \frac{1}{\cos^2 x} < 0$，故取 $x_0 = 4.6$，迭代计算结果见下表：

k	x_k	k	x_k
1	4.545 732 122	4	4.493 412 197
2	4.506 145 588	5	4.493 409 458
3	4.494 171 63	6	4.493 409 458

所以 $x - \tan x = 0$ 的最小正根为 $x^* \approx 4.493\,41$.

9. 研究求$\sqrt{a}$的牛顿公式

$$x_{k+1} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{a}{x_k}\right), \quad x_0 > 0$$

证明对一切 $k = 1, 2, \cdots$, $x_k \geqslant \sqrt{a}$ 且序列 $x_1, x_2, \cdots$ 是递减的.

证法一　用数列的办法. 因 $x_0 > 0$ 由 $x_k = \frac{1}{2}\left(x_{k-1} + \frac{a}{x_{k-1}}\right)$ 知 $x_k > 0$，且

$x_k = \frac{1}{2}\left(\sqrt{x_{k-1}} - \sqrt{\frac{a}{x_{k-1}}}\right)^2 + \sqrt{a} \geqslant \sqrt{a}$, $k = 1, 2, 3, \cdots$. 又由

$$\frac{x_{k+1}}{x_k} = \frac{1}{2} + \frac{a}{2x_k^2} \leqslant \frac{1}{2} + \frac{a}{2a} = 1, \quad \forall k \geqslant 1$$

故 $x_{k+1} \leqslant x_k$，即 $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ 单减有下界$\sqrt{a}$. 根据单调有界原理知，$\{x_k\}$ 有极限. 易证其极限为$\sqrt{a}$.

证法二　设 $f(x) = x^2 - a, x \in (0, +\infty)$，则 $f(0) = -a < 0, f(+\infty) >$

0，因此 $f(x)=0$ 在 $[0,+\infty)$ 内有根。由 $f'(x)=2x>0$ 知，$f(x)$ 在 $x>0$ 时单调增加，故 $f(x)=0$ 在 $(0,+\infty)$ 内有唯一实根 $\sqrt{a}$. 又 $f''(x)=2$，故当 $x_0\geqslant\sqrt{a}$ 时对 $f(x)$ 应用牛顿迭代法，得

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}=x_k-\frac{x_k^2-a}{2x_k}=\frac{1}{2}\left(x_k+\frac{a}{x_k}\right),\quad k=0,1,2,\cdots$$

收敛. 当 $0<x_0<\sqrt{a}$ 时，

$$x_1=\frac{1}{2}\left(x_0+\frac{a}{x_0}\right)=\frac{1}{2}\left[\sqrt{x_0}-\sqrt{\frac{a}{x_0}}\right]^2+\sqrt{a}>\sqrt{a}$$

此时，从 x_1 起，$\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ 单减有下界 $\sqrt{a}$，且极限仍为 $\sqrt{a}$.

10. 对于 $f(x)=0$ 的牛顿公式 $x_{k+1}=x_k-\dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)}$，证明

$$R_k=\frac{x_k-x_{k-1}}{(x_{k-1}-x_{k-2})^2}$$

收敛到 $-\dfrac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$，这里 x^* 为 $f(x)=0$ 的根.

证明 根据牛顿迭代法有

$$x_k=x_{k-1}-\frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})},\quad k=1,2,3,\cdots$$

故
$$x_k-x_{k-1}=-\frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$$

$$\begin{aligned}\frac{x_k-x_{k-1}}{(x_{k-1}-x_{k-2})^2}&=-\frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}\left[\frac{f'(x_{k-2})}{f(x_{k-2})}\right]^2=\\&-\frac{f(x_{k-1})-f(x^*)}{[f(x_{k-1})-f(x^*)]^2}\frac{[f'(x_{k-2})]^2}{f'(x_{k-1})}=\\&-\frac{f'(\xi_{k-1})[f'(x_{k-2})]^2}{f'(x_{k-1})[f'(\xi_{k-2})]^2}\frac{(x_{k-1}-x^*)}{(x_{k-2}-x^*)^2}\end{aligned}$$

其中 ξ_{k-1} 介于 x_{k-1} 与 x^* 之间，ξ_{k-2} 介于 x_{k-2} 与 x^* 之间，根据式(7.14)得

$$\lim_{k\to\infty}\frac{x_k-x_{k-1}}{(x_{k-1}-x_{k-2})^2}=-\lim_{k\to\infty}\frac{f'(\xi_{k-1})}{f'(x_{k-1})}\left[\frac{f'(x_{k-2})}{f'(\xi_{k-2})}\right]^2\frac{x_{k-1}-x^*}{(x_{k-2}-x^*)^1}=$$
$$-\frac{1}{2}\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}$$

11. 用牛顿法和求重根的牛顿迭代法(7.15)和(7.16)(书中是式(4.13)和式(4.14))计算方程 $f(x)=\left(\sin x-\dfrac{x}{2}\right)^2=0$ 的一个近似根，准确到 10^{-5}，初

始值 $x_0=\frac{\pi}{2}$.

解　$f(x)=\left(\sin x-\frac{x}{2}\right)^2$ 的根 x^* 为2重根

$$f'(x)=2\left(\sin x-\frac{x}{2}\right)\left(\cos x-\frac{1}{2}\right)$$

用牛顿法迭代公式为

$$x_{k+1}=x_k-\frac{\left(\sin x_k-\frac{1}{2}x_k\right)^2}{2\left(\sin x_k-\frac{1}{2}x_k\right)\left(\cos x_k-\frac{1}{2}\right)}=$$

$$x_k-\frac{\sin x_k-\frac{1}{2}x_k}{2\cos x_k-1},\quad k=0,1,\cdots$$

令 $x_0=\frac{\pi}{2}$,则 $x_1=1.785\ 398$, $x_2=1.844\ 562$, …,迭代到 $x_{29}=1.895\ 494$, $|x^*-1.895\ 49|<10^{-5}$.

用求重根的迭代公式(7.15),迭代公式为

$$x_{k+1}=x_k-\frac{\sin x_k-\frac{1}{2}x_k}{\cos x_k-\frac{1}{2}},\quad k=0,1,2,\cdots$$

取 $x_0=\frac{\pi}{2}$,则 $x_1=2.000\ 000$, $x_2=1.900\ 996$, $x_3=1.895\ 512$, $x_4=1.895\ 494$, $x_5=1.895\ 494$. 四次迭代达到了上面 x_{29} 的结果.

若用公式(7.16),则有

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)f'(x_k)}{[f'(x_k)]^2-f(x_k)f''(x_k)}$$

将 $f(x)$、$f'(x)$ 及 $f''(x)=2\left(\cos x-\frac{1}{2}\right)^2-2\sin x\left(\sin x-\frac{1}{2}x\right)$代入上述迭代公式,得

$$x_{k+1}=x_k-\frac{\left(\sin x_k-\frac{1}{2}x_k\right)\left(\cos x_k-\frac{1}{2}\right)}{\left(\cos x_k-\frac{1}{2}\right)^2+\sin x_k\left(\sin x_k-\frac{1}{2}x_k\right)}$$

取 $x_0=\frac{\pi}{2}$,得 $x_1=1.801\ 749$, $x_2=1.889\ 630$, $x_3=1.895\ 474$, $x_4=$

1.895 494，$x_5 = 1.895\ 494$.

12. 应用牛顿法于方程 $x^3 - a = 0$，导出求立方根 $\sqrt[3]{a}$ 的迭代公式，并讨论其收敛性.

解 设 $f(x) = x^3 - a$，$f'(x) = 3x^2$，$f''(x) = 6x$，牛顿法迭代公式为

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^3 - a}{3x_k^2} = \frac{2x_k^3 + a}{3x_k^2},\quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

当 $a \neq 0$ 时，$f(x)$ 的单根为 $\sqrt[3]{a}$，此时牛顿法在根 x^* 附近是平方收敛的.

当 $a = 0$ 时，迭代公式化为

$$x_{k+1} = \frac{2}{3}x_k$$

则 $x_k \to 0$，故对 $\forall x_0 \in \mathbf{R}$ 均收敛.

13. 应用牛顿法于方程 $f(x) = 1 - \frac{a}{x^2} = 0$，导出求 $\sqrt{a}$ 的迭代公式，并用此公式求 $\sqrt{115}$ 的值.

解 $f(x) = 1 - \frac{a}{x^2}$，$f'(x) = \frac{2a}{x^3}$，$x \neq 0$，根据牛顿迭代公式有

$$x_{k+1} = x_k - \frac{1 - \frac{a}{x_k^2}}{\frac{2a}{x_k^3}} = \frac{1}{2}x_k\left(3 - \frac{x_k^2}{a}\right),\quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

可知 $f''(x) = -\frac{6a}{x^4} < 0$. 故取 $x_0 \in (0, \sqrt{a})$ 时，迭代收敛.

对于 $\sqrt{115}$，取 $x_0 = 9$，迭代计算，得

$$x_1 = 10.330\ 434\ 78,\quad x_2 = 10.702\ 425\ 53,\quad x_3 = 10.723\ 741\ 4$$

$$x_4 = 10.723\ 805\ 29,\quad x_5 = 10.723\ 805\ 29$$

故 $\sqrt{115} \approx 10.723\ 805\ 29$.

14. 应用牛顿法于方程 $f(x) = x^n - a = 0$ 和 $f(x) = 1 - \frac{a}{x^n} = 0$，分别导出求 $\sqrt[n]{a}$ 的迭代公式，并求

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\sqrt[n]{a} - x_{k+1}}{(\sqrt[n]{a} - x^k)^2}$$

解 若 $f(x) = x^n - a$，则有 $f'(x) = nx^{n-1}$，牛顿迭代法为

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^n - a}{nx_k^{n-1}} = \frac{1}{n}\left[(n-1)x_k + \frac{a}{x_k^{n-1}}\right],\quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

根据定理 7.4 知 $\left(\varphi''(\sqrt[n]{a}) = \frac{n-1}{\sqrt[n]{a}}\right)$

$$\lim_{k\to\infty}\frac{(\sqrt[n]{a}-x_{k+1})}{(\sqrt[n]{a}-x_k)^2} = -\frac{1}{2}\frac{n-1}{\sqrt[n]{a}}$$

对于 $f(x) = 1-\frac{a}{x^n}$，$f'(x) = \frac{na}{x^{n+1}}$，牛顿迭代法公式为

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = \frac{x_k}{n}\left[(n+1)-\frac{x_k^n}{a}\right],\quad k=0,1,2,\cdots$$

根据定理 7.4 知 $\left(\varphi''(\sqrt[n]{a}) = -\frac{n+1}{\sqrt[n]{a}}\right)$

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\sqrt[n]{a}-x_{k+1}}{(\sqrt[n]{a}-x_k)^2} = \frac{1}{2}\frac{n+1}{\sqrt[n]{a}}$$

15. 证明迭代公式

$$x_{k+1} = \frac{x_k(x_k^2+3a)}{3x_k^2+a}$$

是计算 $\sqrt{a}$ 的三阶方法．假定初值 x_0 充分靠近根 $x^* = \sqrt{a}$，求

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\sqrt{a}-x_{k+1}}{(\sqrt{a}-x_k)^3}$$

证明　若设 $\varphi(x) = \frac{x(x^2+3a)}{3x^2+a}$，则有 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 且 $\varphi(\sqrt{a}) = \sqrt{a}$．由 $\varphi(x)$ 的定义，有

$$(3x^2+a)\varphi(x) = x(x^2+3a)$$

对上式两端连续求导三次，得

$$6x\varphi(x)+(3x^2+a)\varphi'(x) = 3x^2+3a$$

$$6\varphi(x)+12x\varphi'(x)+(3x^2+a)\varphi''(x) = 6x$$

$$18\varphi'(x)+18x\varphi''(x)+(3x^2+a)\varphi'''(x) = 6$$

代 $x=\sqrt{a}$ 依次入上三式，并利用 $\varphi(\sqrt{a}) = \sqrt{a}$，得

$$\varphi'(\sqrt{a}) = 0,\quad \varphi''(\sqrt{a}) = 0,\quad \varphi'''(\sqrt{a}) = \frac{3}{2a}\neq 0$$

所以迭代公式是求 $\sqrt{a}$ 的三阶方法

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\sqrt{a}-x_{k+1}}{(\sqrt{a}-x_k)^3} = \frac{1}{3!}\cdot\frac{3}{2a} = \frac{1}{4a}$$

16. 用牛顿法解方程组

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = 4 \\ x^2 - y^2 = 1 \end{cases}$$

取 $x^{(0)} = (1.6, 1.2)^T$.

解 若 $f_1(x, y) = x^2 + y^2 - 4$，$f_2(x, y) = x^2 - y^2 - 1$，则

$$F'(x, y) = \begin{bmatrix} 2x & 2y \\ 2x & -2y \end{bmatrix}, \quad [F'(x, y)]^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4x} & \frac{1}{4x} \\ \frac{1}{4y} & -\frac{1}{4y} \end{bmatrix}$$

牛顿迭代法为

$$\begin{pmatrix} x^{(k+1)} \\ y^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \end{pmatrix} - [F'(x^{(k)}, y^{(k)})]^{-1} \begin{pmatrix} f_1(x^{(k)}, y^{(k)}) \\ f_2(x^{(k)}, y^{(k)}) \end{pmatrix}$$

代初值 $x^{(0)} = (1.6, 1.2)^T$，迭代计算，得

$$\begin{pmatrix} x^{(1)} \\ y^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.581\ 250 \\ 1.225\ 000 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x^{(2)} \\ y^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.581\ 138\ 834 \\ 1.224\ 744\ 898 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x^{(3)} \\ y^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.581\ 138\ 830 \\ 1.224\ 744\ 871 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x^{(4)} \\ y^{(4)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.581\ 138\ 830 \\ 1.224\ 744\ 871 \end{pmatrix}$$

第 8 章　矩阵特征值问题计算

1.1　重点、难点全析

已知 $A=(a_{ij})_{n\times n}$，称 $\varphi(\lambda)=\det(\lambda I-A)$ 为 A 的特征多项式，特征方程 $\varphi(\lambda)=\det(\lambda I-A)=0$ 的根称为 A 的特征值，相应于特征值 λ 的齐次方程组 $(\lambda I-A)x=0$ 的非零解 x 称为矩阵 A 的对应于 λ 的特征向量．

求解矩阵 A 的特征值及对应的特征向量的办法有两类：一类是幂法与反幂法，属迭代法；另一类是正交相似变换的方法，属变换法．如雅可比法和 QR 方法等．

1. 幂法

幂法是一种计算矩阵主特征值(按模最大的特征值及对应特征向量）的迭代方法．

定理8.1　设 $A\in \mathbf{R}^{n\times n}$ 有 n 个线性无关的特征向量，主特征值 λ_1 满足 $|\lambda_1|>|\lambda_2|\geqslant|\lambda_3|\geqslant\cdots\geqslant|\lambda_n|$，则对任意非零初始向量 $v_0=u_0$，按下述方法构造的向量序列 $\{u_k\}$、$\{v_k\}$：

$$\left.\begin{aligned} v_0&=u_0\neq 0\\ v_k&=Au_{k-1}\\ \mu_k&=\max(v_k)\\ u_k&=\frac{v_k}{\mu_k},\quad k=1,2,\cdots\end{aligned}\right\}\tag{8.1}$$

有 (1) $\lim\limits_{k\to\infty}u_k=\dfrac{x_1}{\max(x_1)}$；(2) $\lim\limits_{k\to\infty}\mu_k=\lambda_1$．

其中 $\max(v^{(k)})$ 表示向量 $v^{(k)}$ 的绝对值最大的分量．

幂法可用原点平移法进行加速收敛的计算，对于实对称矩阵，也可用瑞利商加速法进行计算．关于主特征值是其他情况的，仍可用幂法进行计算．

2. 反幂法

反幂法用来计算非奇异实矩阵按模最小的特征值及其特征向量，结合原点平移法，也可用来计算对应于一个给定近似特征值的特征向量.

反幂法迭代公式为：任取初始向量 $v_0 = u_0 \neq 0$，即

$$\left.\begin{aligned} v_k &= A^{-1}u_{k-1} \\ u_k &= \frac{v_k}{\max(v_k)}, \quad k = 1, 2, \cdots \end{aligned}\right\} \tag{8.2}$$

定理 8.2 设 A 为非奇异实矩阵，且有 n 个线性无关的特征向量，其对应的特征值满足

$$|\lambda_1| \geqslant |\lambda_2| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n| > 0$$

则对任何初始向量 $u_0(\alpha_n \neq 0)$，由反幂法构造的向量序列 $\{v_k\}$，$\{u_k\}$ 满足

(1) $\lim\limits_{k\to\infty} u_k = \dfrac{x_n}{\max(x_n)}$；(2) $\lim\limits_{k\to\infty}\max(v_k) = \dfrac{1}{\lambda_n}$.

定理 8.3 设 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ 有 n 个线性无关的特征向量. A 的特征值及对应的特征向量分别记为 λ_i 及 $x_i(i = 1, 2, \cdots, n)$，而 p 为 λ_j 的近似值，$(A - pI)^{-1}$ 存在，且 $|\lambda_j - p| \ll |\lambda_i - p|\ (i \neq j)$，则对任意非零初始向量 $u_0 = v_0(\alpha_j \neq 0)$，由原点平移的反幂法迭代公式

$$\left.\begin{aligned} v_k &= (A - pI)^{-1}u_{k-1} \\ u_k &= \frac{v_k}{\max(v_k)}, \quad k = 1, 2, \cdots \end{aligned}\right\} \tag{8.3}$$

产生的向量序列 $\{v_k\}$，$\{u_k\}$ 满足

(1) $\lim\limits_{k\to\infty} u_k = \dfrac{x_j}{\max(x_j)}$；

(2) $\lim\limits_{k\to\infty}\max(v_k) = \dfrac{1}{\lambda_j - p}$，即 $p + \dfrac{1}{\max(v_k)} \to \lambda_j(k \to \infty)$.

反幂法迭代公式(8.2)，(8.3) 中的 v_k 是通过解方程组 $Av_k = u_{k-1}$ 和 $(A - pI)v_k = u_{k-1}$ 而得.

3. 雅可比方法

雅可比方法是求一个实对称矩阵的全部特征值和特征向量的方法，其基本思想是通过一系列正交相似变换，把实对称矩阵化为对角阵，该对角阵的对角元就是原矩阵的特征值，所用的正交变换为平面旋转变换(也称 Givens 变换).

记 $A_0 = A$，雅可比方法为

$$A_k = R_k A_{k-1} R_k^{\mathrm{T}}, \quad k = 1, 2, \cdots \tag{8.4}$$

其中 R_k 为平面旋转变换 $R(p, q, \theta)$，p，$q(p < q)$ 为 A_{k-1} 中按模最大的非对角

元的下标，θ 的选取应使 $a_{pq}^{(k)}=0$. 当 $a_{pp}^{(k-1)}=a_{qq}^{(k-1)}$ 时

$$\cos\theta=\frac{\sqrt{2}}{2},\quad \sin\theta=\operatorname{sign}(a_{pq}^{(k-1)})\cos\theta$$

当 $a_{pp}^{(k-1)}\neq a_{qq}^{(k-1)}$ 时，令

$$c=\frac{a_{pp}^{(k-1)}-a_{qq}^{(k-1)}}{2a_{pq}^{(k-1)}},\quad t=\tan\theta=\frac{\operatorname{sign}(c)}{|c|+\sqrt{c^2+1}}$$

$$\cos\theta=\frac{1}{\sqrt{1+t^2}},\quad \sin\theta=t\cos\theta$$

这样就确定了 $\boldsymbol{R}_k=\boldsymbol{R}(p,q,\theta)$，并使 $a_{pq}^{(k)}=a_{qp}^{(k)}=0$，$\boldsymbol{R}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_2^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{R}_k^{\mathrm{T}}$ 的各列分别是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值对应的特征向量.

雅可比方法是收敛的.

4. QR 方法

QR 方法是用来求实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的全部特征值的方法. 它主要由两步组成：首先通过反射变换(Householder 变换)把 $\boldsymbol{A}$ 正交相似变换为上海森伯格阵；然后把所得之上海森伯格阵通过 QR 方法变换为本质收敛的上三角阵. QR 方法如下：

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{A}_1&=\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}_1\\ \boldsymbol{A}_k&=\boldsymbol{R}_{k-1}\boldsymbol{Q}_{k-1}=\boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{R}_k\end{aligned}\right\}\quad k=2,3,\cdots \tag{8.5}$$

其中的 QR 分解常用平面旋转变换完成.

关于 QR 方法的收敛性及当 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵时的相关结论见教材. 为加速收敛，也可使用带原点平移的 QR 算法. 当特征值为共轭复根时，可用双步原点平移的 QR 方法.

1.2　习题全解

1. 用幂法计算下列矩阵的主特征值及对应的特征向量：

$$(1)\ \boldsymbol{A}_1=\begin{bmatrix}7&3&-2\\3&4&-1\\-2&-1&3\end{bmatrix};\quad (2)\ \boldsymbol{A}_2=\begin{bmatrix}3&-4&3\\-4&6&3\\3&3&1\end{bmatrix}.$$

当特征值有 3 位小数稳定时迭代终止.

解　套用幂法公式

$$u_0 \neq 0, \ v_k = Au_{k-1}, \quad u_k = \frac{v_k}{\max(v_k)}, \quad k = 1, 2, \cdots$$

取 $u_0 = (1, 1, 1)^T \neq 0$，将 A_1 代入上式，计算结果见下表：

k	u_k^T	$\max(v_k)$
1	(1, 0.75, 0)	8
2	(1, 0.648 648 649, − 0.297 297 297)	9.25
4	(1, 0.608 798 347, − 0.388 839 681)	9.594 900 850
6	(1, 0.605 776 832, − 0.394 120 752)	9.605 429 002
7	(1, 0.605 609 752, − 0.394 368 924)	9.605 572 002

即 A_1 的主特征值 $\lambda_1 \approx 9.605\ 572$，特征向量 $x_1 \approx (1, 0.605\ 610, -0.394\ 369)^T$.

将 A_2 代入幂法公式，取 $u_0 = (1, 1, 1)^T$，计算结果见下表：

k	u_k^T	$\max(v_k)$
1	(0.285 714 286, 0.714 285 714, 1)	7
2	(0.162 790 698, 1, 0.651 162 791)	6.142 857 143
5	(− 0.476 667 405, 1, 0.275 116 331)	8.400 967 982
10	(0.598 164 195, 1, 0.155 993 744)	8.855 264 597
16	(− 0.604 221 865, 1, 0.150 937 317)	8.869 534 947
17	(− 0.604 288 082, 1, 0.150 881 291)	8.869 699 412

故 A_2 的主特征值 $\lambda_1 \approx 8.869\ 699$，主特征向量为 $(-0.604\ 288, 1, 0.150\ 881)^T$.

2. 利用反幂法求矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

的最接近于 6 的特征值及对应的特征向量.

解 A 的特征值的近似值 $p = 6$，将

$$B = A - pI = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 2 & -3 & 1 \\ 1 & 1 & -5 \end{bmatrix}$$

进行三角分解：$PB = LU$，其中

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & \frac{4}{5} & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 2 & -3 & 1 \\ 0 & \frac{5}{2} & -\frac{11}{2} \\ 0 & 0 & \frac{27}{5} \end{bmatrix}$$

根据 $Uv_1 = (1, 1, 1)^T$ 解得 v_1，$u_1 = \dfrac{v_1}{\max(v_1)}$，故

$$Ly_k = Pu_{k-1},\ Uv_k = y_k,\quad u_k = \frac{v_k}{\max(v_k)},\quad k = 2, 3, \cdots$$

计算得以下结果：

$v_1 = (1.618\ 518\ 519, 0.807\ 407\ 407, 0.185\ 185\ 185)^T$

$u_1 = (1, 0.498\ 855\ 835, 0.114\ 416\ 475)^T$, $\lambda \approx 6.617\ 848\ 97$

$y_2 = (0.498\ 855\ 835, -0.135\ 011\ 442, 1.108\ 009\ 154)^T$

$v_2 = (0.742\ 944\ 316, 0.397\ 406\ 559, 0.205\ 186\ 88)^T$

$u_2 = (1, 0.534\ 907\ 597, 0.276\ 180\ 698)^T$, $\lambda \approx 7.345\ 995\ 896$

$y_3 = (0.534\ 907\ 597, 0.008\ 726\ 899, 0.993\ 018\ 48)^T$

$v_3 = (0.787\ 588\ 409, 0.408\ 053\ 844, 0.183\ 892\ 311)^T$

$u_3 = (1, 0.518\ 105\ 446, 0.233\ 487\ 833)^T$, $\lambda \approx 7.269\ 698\ 727$

$y_4 = (0.518\ 105\ 446, -0.025\ 564\ 89, 1.020\ 451\ 912)^T$

$v_4 = (0.772\ 837\ 002, 0.405\ 513\ 711, 0.188\ 972\ 576)^T$

$u_4 = (1, 0.524\ 707\ 939, 0.244\ 518\ 023)^T$, $\lambda \approx 7.293\ 933\ 905$

$y_5 = (0.524\ 707\ 939, -0.017\ 835\ 946, 1.014\ 268\ 757)^T$

$v_5 = (0.777\ 569\ 535, 0.406\ 086\ 226, 0.187\ 827\ 547)^T$

$u_5 = (1, 0.522\ 250\ 689, 0.241\ 557\ 235)^T$, $\lambda \approx 7.286\ 058\ 616$

$y_6 = (0.522\ 250\ 689, -0.019\ 568\ 109, 1.015\ 654\ 488)^T$

$v_6 = (0.776, 020\ 139, 0.405\ 957\ 918, 0.188\ 084\ 164)^T$

$u_6 = (1, 0.523\ 128\ 07, 0.242\ 370\ 209)^T$, $\lambda \approx 7.288\ 626\ 351$

$y_7 = (0.523\ 128\ 07, -0.019\ 193\ 826, 1.015\ 355\ 061)^T$

$v_7 = (0.776\ 528\ 141, 0.405\ 985\ 642, 0.188\ 028\ 715)^T$

$$u_7 = (1,\ 0.522\ 821\ 544,\ 0.242\ 140\ 245)^{\mathrm{T}},\ \lambda \approx 7.287\ 783\ 336$$

观察结果得,A 的与 6 最接近的特征值约为 7.288,对应特征向量为(1,0.522 8,0.242 1)$^{\mathrm{T}}$.

3. 求矩阵

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

与特征值 4 对应的特征向量.

解　矩阵有特征值 4,4,2. 故可用幂法求解,取 $u_0 = (1,\ 1,\ 1)^{\mathrm{T}}$,利用幂法计算得

$$v_1 = (4,\ 4,\ 4)^{\mathrm{T}},\quad u_1 = (1,\ 1,\ 1),\quad \max(v_1) = 4$$

$$v_2 = (4,\ 4,\ 4)^{\mathrm{T}},\quad u_2 = (1,\ 1,\ 1),\quad \max(v_1) = 4$$

故与特征值 4 对应的特征向量为(1,1,1)$^{\mathrm{T}}$.

4. (1) 设 A 是对称矩阵,λ 和 x($\| x \|_2 = 1$)是 A 的一个特征值及相应的特征向量. 又设 P 为正交阵,使 $Px = e_1 = (1,\ 0,\ \cdots,\ 0)^{\mathrm{T}}$. 证明 $B = PAP^{\mathrm{T}}$ 的第一行和第一列除了 λ 外其余元素均为零.

(2) 对于矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 10 & 2 \\ 10 & 5 & -8 \\ 2 & -8 & 11 \end{bmatrix}$$

$\lambda = 9$ 是其特征值,$x = \left(\frac{2}{3},\ \frac{1}{3},\ \frac{2}{3}\right)^{\mathrm{T}}$ 是相应于 9 的特征向量,试求一初等反射阵 P,使 $Px = e_1$,并计算 $B = PAP^{\mathrm{T}}$.

解(1)　$B = PAP^{\mathrm{T}}$,$B^{\mathrm{T}} = (PAP^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} = PA^{\mathrm{T}}P^{\mathrm{T}} = PAP^{\mathrm{T}}$,故 B 为对称矩阵.又 $Ax = \lambda x$,P 为正交阵且 $Px = e_1$,故由 $PAP^{\mathrm{T}}Px = PAx$ 得 $Be_1 = \lambda Px = \lambda e_1$,即 λ 是 B 的特征值,e_1 是 B 的与λ 对应的特征向量. 再由 $Be_1 = \lambda e_1$ 知 $b_{21} = b_{31} = \cdots = b_{n1} = 0$,$b_{11} = \lambda$,根据对称性知 $b_{12} = b_{13} = \cdots = b_{1n} = 0$,即 B 的第一行,第一列的元素除 $b_{11} = \lambda$ 外,其余全为零.

(2)　取 $u = x - e_1$ 作为反射镜面的法向量,可将 x 变为 e_1. 此时 $u = \left(-\frac{1}{3},\ \frac{1}{3},\ \frac{2}{3}\right)^{\mathrm{T}}$,反射矩阵

$$P = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

从而有

$$B = PAP^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 \\ 0 & 18 & 0 \\ 0 & 0 & -9 \end{bmatrix}$$

5. 利用初等反射阵将

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

正交相似约化为对称三对角阵．

解　对向量$(3,4)^{\mathrm{T}}$作反射变换，使其变得与$e_1' = (1,0)$平行．此时

$$\sigma = \sqrt{3^2+4^2} = 5,\ u = (8,4)^{\mathrm{T}},\ \beta = \frac{1}{2}\|u\|_2^2 = \sigma(\sigma+3) = 40$$

$$H_2 = I_2 - \frac{1}{40}\begin{pmatrix} 8 \\ 4 \end{pmatrix}(8,4) = \begin{bmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{bmatrix}$$

所以，所求的反射阵为

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ 0 & -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{bmatrix}$$

且

$$HAH = \begin{bmatrix} 1 & -5 & 0 \\ -5 & \frac{73}{25} & \frac{14}{25} \\ 0 & \frac{14}{25} & -\frac{23}{25} \end{bmatrix}$$

6. 设A_{n-1}是由豪斯霍尔德方法得到的矩阵，又设y是A_{n-1}的一个特征向量．

(1) 证明矩阵 A 对应的特征向量是 $x = P_1P_2\cdots P_{n-2}y$；

(2) 对于给出的 y 应如何计算 x？

证明 (1) $A_{n-1} = P_{n-2}P_{n-3}\cdots P_1AP_1\cdots P_{n-2}$，设对应的特征值为 λ，则 $A_{n-1}y = \lambda y$，所以有

$$P_{n-2}\cdots P_2P_1AP_1P_2\cdots P_{n-2}y = \lambda y$$

$$A(P_1P_2\cdots P_{n-2}y) = \lambda(P_1P_2\cdots P_{n-2}y)$$

故 $x = P_1P_2\cdots P_{n-2}y$ 是 A 的与特征值 λ 对应的特征向量.

(2) 因 $P_1, P_2, \cdots, P_{n-2}$ 都是反射矩阵且是在计算 A_{n-1} 的过程中得到的，故可以采用如下过程计算 x. 令 $H_1 = P_1$

$$H_k = P_kH_{k-1},\quad k = 2,3,\cdots,n-2$$

$$x = H_{n-2}^{T}y$$

7. 用带位移的 QR 方法计算

$$(1)\ A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix};\quad (2)\ B = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

的全部特征值.

解 (2) 记 $A_1 = A$，取 $s_k = a_{nn}^{(k)}$ 作为平移因子来计算 A 的全部特征值.

$s_1 = 3$

$$P_{23}P_{12}(A_1 - s_1I) = R = \begin{bmatrix} 2.828\,427\,124 & -4.242\,604\,686 & 0.707\,106\,781 \\ 0 & 1.732\,050\,806 & -0.577\,350\,268 \\ 0 & 0 & 0.408\,248\,245 \end{bmatrix}$$

$$A_2 = RP_{12}^{T}P_{23}^{T} + s_1I = \begin{bmatrix} -2.0 & 1.224\,744\,87 & 0 \\ 1.224\,744\,87 & 1.666\,666\,667 & 0.235\,702\,26 \\ 0 & 0.235\,702\,26 & 3.333\,333\,333 \end{bmatrix}$$

$s_2 = 3.333\,333\,333$

$$P_{23}P_{12}(A_2 - s_2I) = R = \begin{bmatrix} 5.472\,151\,717 & -1.566\,698\,9 & 0.052\,753\,495 \\ 0 & 1.370\,688\,834 & -0.226\,301 \\ 0 & 0 & 0.039\,502\,921 \end{bmatrix}$$

$$A_3 = RP_{12}^{T}P_{23}^{T} + s_2I = \begin{bmatrix} -2.350\,649\,345 & 0.306\,779\,526 & 0 \\ 0.306\,779\,526 & 1.978\,401\,822 & 0.006\,792\,831 \\ 0 & 0.006\,792\,831 & 3.372\,247\,822 \end{bmatrix}$$

$s_3 = 3.372\,247\,822$

$$P_{23}P_{12}(A_3 - s_3 I) = R = \begin{bmatrix} 5.731\,113\,823 & -0.380\,950\,572 & 0.000\,363\,611 \\ 0 & 1.375\,442\,892 & 0.000\,330\,107 \\ 0 & 0 & 0.000\,033\,499 \end{bmatrix}$$

$$A_4 = RP_{12}^{\mathrm{T}}P_{23}^{\mathrm{T}} + s_3 I = \begin{bmatrix} -2.371\,041\,162 & 0.073\,625\,778 & 0 \\ 0.073\,625\,778 & 1.998\,760\,145 & 0 \\ 0 & 0 & 3.372\,281\,32 \end{bmatrix}$$

故 A 有一个特征值 $\lambda_1 = 3.372\,281\,32$. 对 A_4 的子矩阵

$$\tilde{A}_4 = \begin{bmatrix} -2.371\,041\,162 & 0.073\,625\,778 \\ 0.073\,625\,778 & 1.998\,760\,145 \end{bmatrix}$$

继续进行变换，取 $s_4 = 1.998\,760\,145$，得

$$P_{12}(\tilde{A}_4 - s_4 I) = R = \begin{bmatrix} 4.370\,421\,512 & -0.073\,615\,329 \\ 0 & -0.001\,240\,327 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{A}_5 = RP_{12}^{\mathrm{T}} + s_4 I = \begin{bmatrix} -2.372\,281\,308 & -0.000\,020\,895 \\ -0.000\,020\,895 & 1.998\,760\,145 \end{bmatrix}$$

因此 A 的另两近似特征值分别为 $-2.372\,281\,308$ 和 $1.998\,760\,145$.（实际上 A 特征值为 $\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{33}$ 和 2. 只要再对 $\tilde{A}_5$ 变换一次即可得到准确值 $\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{33}}{2}$ 和 2.）

(2) 记 $B_1 = B$，按 $s_k = a_{nn}^{(k)}$ 的办法选取平移因子，则 $s_1 = 1$.

$$P_{23}P_{12}(B_1 - s_1 I) = R = \begin{bmatrix} 2.236\,068 & 1.341\,641 & 0.447\,214 \\ 0 & 1.095\,445 & 0.365\,148 \\ 0 & 0 & -0.816\,497 \end{bmatrix}$$

$$B_2 = RP_{12}^{\mathrm{T}}P_{23}^{\mathrm{T}} + s_1 I = \begin{bmatrix} 3.6 & 0.489\,898 & 0 \\ 0.489\,898 & 1.733\,333 & -0.745\,356 \\ 0 & -0.745\,356 & 0.666\,667 \end{bmatrix}$$

$s_2 = 0.666\,667$

$$P_{23}P_{12}(B_2 - s_2 I) = R = \begin{bmatrix} 2.973\,961 & 0.658\,916 & -0.122\,782 \\ 0 & 1.224\,403 & -0.583\,259 \\ 0 & 0 & -0.447\,537 \end{bmatrix}$$

$$B_3 = RP_{12}^{\mathrm{T}}P_{23}^{\mathrm{T}} + s_2 I = \begin{bmatrix} 3.708\,543 & 0.201\,695 & 0 \\ 0.201\,695 & 1.979\,853 & 0.272\,439 \\ 0 & 0.272\,439 & 0.311\,608 \end{bmatrix}$$

$s_3 = 0.311\,608$

$$P_{23}P_{12}(B_3 - s_3 I) = R = \begin{bmatrix} 3.402\,917\,308 & 0.300\,218\,995 & 0.016\,147\,747 \\ 0 & 1.675\,653\,371 & 0.268\,341\,036 \\ 0 & 0 & -0.044\,216\,968 \end{bmatrix}$$

$$B_4 = RP_{12}^{T}P_{23}^{T} + s_3 I = \begin{bmatrix} 3.726\,337 & 0.099\,318 & 0 \\ 0.099\,318 & 2.005\,687 & -0.007\,189 \\ 0 & -0.007\,189 & 0.267\,979 \end{bmatrix}$$

$s_4 = 0.267\,979$

$$P_{23}P_{12}(B_4 - s_4 I) = R = \begin{bmatrix} 3.459\,784 & 0.149\,160 & -0.000\,206 \\ 0 & 1.734\,156 & -0.007\,186 \\ 0 & 0 & -0.000\,030 \end{bmatrix}$$

$$B_5 = RP_{12}^{T}P_{23}^{T} + s_4 I = \begin{bmatrix} 3.730\,619 & 0.049\,781 & 0 \\ 0.049\,781 & 2.001\,435 & 0 \\ 0 & 0 & 0.267\,949 \end{bmatrix}$$

现在收缩，继续对 B_5 的子矩阵

$$\widetilde{B}_5 = \begin{bmatrix} 3.730\,619 & 0.049\,781 \\ 0.049\,781 & 2.001\,435 \end{bmatrix}$$

进行变换，得到

$$\widetilde{B}_6 = P_{12}(\widetilde{B}_5 - s_5 I)P_{12}^{T} + s_5 I = \begin{bmatrix} 3.732\,051 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

故求得 B 的近似特征值为

$$\lambda_1 = 3.732\,051,\quad \lambda_2 = 2,\quad \lambda_3 = 0.267\,949$$

8. 试用初等反射阵将

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & -1 \\ 2 & -4 & 5 \end{bmatrix}$$

分解成 QR 的形式，其中 Q 为正交阵，R 为上三角阵.

解　第一步，将 A 的第一列变为与 e_1 平行的向量. 取 $\sigma_1 = (1^2+2^2-2^2)^{\frac{1}{2}} = 3$，$u_1 = (1,2,2)^T + \sigma e_1 = (4,2,2)^T$，$\beta_1 = \frac{1}{2}\|u_1\|_2^2 = \sigma_1(\sigma_1+0) = 12$，因此，所求反射阵为

$$P_1 = I - \beta_1^{-1} u_1 u_1^T = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

$$P_1 A = \begin{bmatrix} -3 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & -3 \\ 0 & -3 & 3 \end{bmatrix}$$

第二步，将 $P_1 A$ 的第 2 列中的二维向量$(0, -3)^T$ 变成与 $e_2 = (1, 0)$ 平行的向量．取 $\sigma_2 = -3$，$u_2 = (-3, -3)^T$，$\beta_2 = \frac{1}{2}\|u_2\|_2^2 = \sigma_2(\sigma_2 + 0) = \sigma_2^2 = 9$，因此，所求反射阵为

$$P_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad P_2 P_1 A = \begin{bmatrix} -3 & 3 & -3 \\ 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

所以，$A = QR$，其中

$$Q = P_1 P_2 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} -3 & 3 & -3 \\ 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

9．设

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{n\times n}$$

试确定 A 及 A^{-1} 特征值的界．

解　根据 Gerschgorin 圆盘定理知，A 的特征值 λ_i 位于圆盘

$$|\lambda_i - 4| \leqslant 2, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

之内，即 $2 \leqslant \lambda_i \leqslant 6$，　$i = 1, 2, \cdots, n$.

故 A^{-1} 的特征值范围为$\frac{1}{6} \leqslant \frac{1}{\lambda_i} \leqslant \frac{1}{2}$，　$i = 1, 2, \cdots, n$.

10. 设 $A = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} A_{11} & O \\ O & A_{22} \end{pmatrix}\begin{matrix} 3 \\ 2 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 3 & \quad 2 \end{matrix} \end{array}$，又设 λ_i 为 A_{11} 的特征值，λ_j 是 A_{22} 的特征值，$x_i = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)^T$ 为对应于 λ_i，A_{11} 的特征向量，$y_j = (\beta_1, \beta_2)^T$ 为对应于 λ_j，A_{22} 的特征向量．求证：

(1) λ_i，λ_j 为 A 的特征值；

(2) $x_i' = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, 0, 0)^T$ 为对应于 λ_i，A 的特征向量，$y_j' = (0, 0, 0, \beta_1, \beta_2)^T$ 为对应于 λ_j，A 的特征向量．

证明　(1) A 的特征方程为 $\det(A - \lambda I) = 0$，即 $\det(A_{11} - \lambda I_{3\times 3}) \cdot \det(A_{22} - \lambda I_{2\times 2}) = 0$. 由于 λ_i 为 A_{11} 的特征值，λ_j 是 A_{22} 的特征值，故 $\det(A_{11} - \lambda_i I_{3\times 3}) = 0$，$\det(A_{22} - \lambda_j I_{2\times 2}) = 0$，所以 λ_i，λ_j 均是 A 的特征值．

(2) $x_i' = (x_i^T, 0, 0)^T$，$y_j' = (0, 0, 0, y_j^T)^T$，所以

$$Ax_i' = \begin{pmatrix} A_{11} & O \\ O & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} x_i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda_i \begin{pmatrix} x_i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda_i x_i'$$

$$Ay_j' = \begin{pmatrix} A_{11} & O \\ O & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ y_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ A_{22} y_j \end{pmatrix} = \lambda_j \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ y_j \end{pmatrix} = \lambda_j y_j'$$

因此，x_i' 是对应于 λ_i，A 的特征向量，y_j' 是对应于 λ_j，A 的特征向量．

第 9 章　常微分方程初值问题数值解法

1.1　重点、难点全析

1.1.1　基本概念

本章主要研究一阶常微分方程初值问题

$$\left.\begin{array}{ll} y' = f(x, y), & (x, y) \in D = \{(x, y) \mid a \leqslant x \leqslant b,\ y \in \mathbf{R}\} \\ y(x_0) = y_0, & x_0 \in [a, b) \end{array}\right\} \quad (9.1)$$

的数值求解方法．根据常微分方程理论，当 f 关于 y 满足李普希兹条件时，初值问题适定．

所谓数值解法，就是寻求 $y(x)$ 在一系列离散节点

$$x_1 < x_2 < \cdots < x_n < x_{n+1} < \cdots$$

上的近似值 $y_1, y_2, \cdots, y_n, y_{n+1}, \cdots$，相邻两节点的间距 $h_n = x_{n+1} - x_n$，称为步长．一般取等步长的节点，此时记步长为 h.

初值问题(9.1)的求解都采用“步进式”．数值方法有单步与多步之分，也有显式与隐式之分．

1.1.2　简单的数值方法与基本概念

欧拉法　$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n),\quad n = 0, 1, 2, \cdots$

后退欧拉法 $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}),\ n = 0, 1, 2, \cdots$

梯形方法　$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})],\quad n = 0, 1, 2\cdots$

改进的欧拉法

$$\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1})] \end{cases}$$

上述方法都是单步方法，其中后退的欧拉法和梯形方法是隐式方法，需要迭代求解，其迭代公式及收敛性条件详见教材．

问题(9.1)的单步法的一般形式为

$$y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, y_{n+1}, h) \tag{9.2}$$

定义 9.1 设 $y(x)$ 是初值问题(9.1)的准确解，称

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\varphi(x_n, y(x_n), y(x_{n+1}), h) \tag{9.3}$$

为单步法(9.2)的局部截断误差．

定义 9.2 设 $y(x)$ 是初值问题(9.1)的准确解，若存在最大整数 p 使显式单步法(9.2)的局部截断误差满足

$$T_{n+1} = y(x+h) - y(x) - h\varphi(x, y(x), y(x+h), h) = O(h^{p+1}) \tag{9.4}$$

则称方法(9.2)具有 p 阶精度，也称方法(9.2)为 p 阶方法．若将(9.4)的展开式写成

$$T_{n+1} = \psi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

则称 $\psi(x_n, y(x_n))h^{p+1}$ 为局部截断误差主项．

容易证明，欧拉法和后退的欧拉法都是一阶方法，梯形法和改进的欧拉法是二阶方法．

1.1.3 龙格-库塔方法

显式龙格-库塔方法的一般形式为

$$y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h) \tag{9.5}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} &\varphi(x_n, y_n, h) = \sum_{i=1}^{r} c_i K_i \\ &K_1 = f(x_n, y_n) \\ &K_i = f(x_n + \lambda_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{r-1}\mu_{ij}K_j), \quad i = 2, 3, \cdots, r \end{aligned}\right\} \tag{9.6}$$

算式(9.5)、(9.6)称为 r 级显式龙格-库塔方法．

常用的 2 级 2 阶龙格-库塔方法有改进的欧拉公式和中点公式．2 级 2 阶显式龙格-库塔方法不可能达到三阶精度．

经典的四阶龙格-库塔公式为

$$
\left.\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\
K_1 &= f(x_n, y_n) \\
K_2 &= f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_1\right) \\
K_3 &= f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_2\right) \\
K_4 &= f(x_n + h, y_n + hK_3)
\end{aligned}\right\} \tag{9.7}
$$

1.1.4　单步法的收敛性与稳定性

定义 9.3　设 $y(x)$ 是初值问题(8.1)的准确解，y_n 是某一数值方法(如(9.2))的数值解，若对于固定的 $x_n = x_0 + nh$，当 $h \to 0$ 时有 $y_n \to y(x_n)$，则称该数值方法是收敛的.

定理 9.1　假设显式单步法

$$
y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h) \tag{9.8}
$$

具有 p 阶精度，且增量函数 $\varphi(x, y, h)$ 关于 y 满足李普希兹条件

$$
|\varphi(x, y, h) - \varphi(x, \bar{y}, h)| \leqslant L_\varphi |y - \bar{y}|
$$

又设初值 y_0 是准确的，即 $y_0 = y(x_0)$，则其整体截断误差

$$
y(x_n) - y_n = O(h^p)
$$

定义 9.4　若单步法(9.8)的增量函数 φ 满足

$$
\varphi(x, y, 0) = f(x, y)
$$

则称该单步法与初值问题(9.1)相容.

单步法(9.2)收敛的充要条件是此方法与初值问题(9.1)相容.

定义 9.5　单步法(9.2)用于解模型方法 $y' = \lambda y$, $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$，若得到的解 $y_{n+1} = E(h\lambda)y_n$ 满足 $|E(h\lambda)| < 1$，则称方法(9.2)是绝对稳定的. 在 $\mu = h\lambda$ 平面上，使 $|E(h\lambda)| < 1$ 的变量围成的范围，称为绝对稳定域，它与实轴的交称为绝对稳定区间.

1.1.5　线性多步方法

一般形式

$$
y_{n+k} = \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i y_{n+i} + h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f_{n+i} \tag{9.9}
$$

四阶阿当姆斯显式公式与隐式公式

$$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{1}{24}h(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n)$$

$$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{1}{24}h(9f_{n+3} + 19f_{n+2} - 5f_{n+1} + f_n)$$

有关米尔尼方法、汉明方法、预测-校正方法等详见教材.

线性多步方法的构造方法主要是基于数值积分和泰勒展开这两种途径.有关局部截断误差等单步法的基本概念对于多步法也类似成立.

1.2 习题全解

1. 用欧拉法解初值问题

$$y' = x^2 + 100y^2, \quad y(0) = 0$$

取步长 $h = 0.1$,计算到 $x = 0.3$(保留到小数点后 4 位).

解 欧拉法公式为

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) = y_n + h(x_n^2 + 100y_n^2), \quad n = 0, 1, 2$$

代 $y_0 = 0$ 入上式,计算结果为

$$y(0.1) \approx y_1 = 0.0,\ y(0.2) \approx y_2 = 0.001\,0,\ y(0.3) \approx y_3 = 0.005\,01$$

2. 用改进的欧拉法和梯形法解初值问题

$$y' = x^2 + x - y, \quad y(0) = 0$$

取步长 $h = 0.1$,计算到 $x = 0.5$,并与准确解 $y = -e^{-x} + x^2 - x + 1$ 相比较.

解 改进的欧拉法为

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hf(x_n, y_n))]$$

将 $f(x, y) = x^2 + x - y$ 代入上式,得

$$y_{n+1} = \left(1 - h + \frac{h^2}{2}\right)y_n + \frac{h}{2}[(1-h)x_n(1+x_n) + (1+x_{n+1})x_{n+1}]$$

梯形法公式为

$$y_{n+1} = \frac{2-h}{2+h}y_n + \frac{h}{2+h}[x_n(1+x_n) + x_{n+1}(1+x_{n+1})]$$

将 $y_0 = 0$, $h = 0.1$ 代入上二式,计算结果见下表:

x_n	改进欧拉法 y_n	$\|y(x_n)-y_n\|$	梯形法 y_n	$\|y(x_n)-y_n\|$
0.1	0.005 500	$0.337\,418\,036\times10^{-3}$	0.005 238 095	$0.755\,132\,781\times10^{-4}$
0.2	0.021 927 500	$0.658\,253\,078\times10^{-3}$	0.021 405 896	$0.136\,648\,778\times10^{-3}$
0.3	0.050 144 388	$0.962\,608\,182\times10^{-3}$	0.049 367 239	$0.185\,459\,653\times10^{-3}$
0.4	0.090 930 671	$0.125\,071\,672\times10^{-2}$	0.089 903 692	$0.223\,738\,443\times10^{-3}$
0.5	0.144 992 257	$0.152\,291\,668\times10^{-2}$	0.143 722 388	$0.253\,048\,087\times10^{-3}$

可见梯形方法比改进的欧拉法精确．

3. 用梯形方法解初值问题

$$\begin{cases} y'+y=0 \\ y(0)=1 \end{cases}$$

证明其近似解为 $y_n=\left(\frac{2-h}{2+h}\right)^n$，并证明当 $h\to0$ 时，它收敛于原初值问题的准确解 $y=e^{-x}$.

证明　梯形公式为

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})]$$

将 $f(x,y)=-y$ 代入得

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[-y_n-y_{n+1}]$$

解得

$$y_{n+1}=\left(\frac{2-h}{2+h}\right)y_n=\left(\frac{2-h}{2+h}\right)^2y_{n-1}=\cdots=\left(\frac{2-h}{2+h}\right)^{n+1}y_0$$

因为 $y_0=1$，所以

$$y_n=\left(\frac{2-h}{2+h}\right)^n$$

对 $\forall x>0$，以 h 为步长经 n 步运算可求得 $y(x)$ 的近似值 y_n，故 $x=nh$，$n=\frac{x}{h}$．代入上式有

$$y_n=\left(\frac{2-h}{2+h}\right)^{x/h}$$

$$\lim_{h\to 0} y_n = \lim_{h\to 0}\left(\frac{2-h}{2+h}\right)^{\frac{x}{h}} = \lim_{h\to 0}\left(1-\frac{2h}{2+h}\right)^{\frac{x}{h}} =$$

$$\lim_{h\to 0}\left[\left(1-\frac{2h}{2+h}\right)^{\frac{2+h}{2h}}\right]^{\frac{2h}{2+h}\frac{x}{h}} = e^{-x}$$

4. 利用欧拉方法计算积分$\int_0^x e^{t^2}\,dt$在点 $x = 0.5, 1, 1.5, 2$ 的近似值.

解 令 $y(x) = \int_0^x e^{t^2}\,dt$,则有初值问题

$$y' = e^{x^2}, \quad y(0) = 0$$

应用欧拉法,取 $h = 0.5$,计算公式为

$$y_{n+1} = y_n + 0.5e^{x_n^2}, \quad n = 0, 1, 2, 3$$

由 $y(0) = y_0 = 0$,得

$$y(0.5) \approx y_1 = 0.5, \quad y(1.0) \approx y_2 = 1.142$$

$$y(1.5) \approx y_3 = 2.501, \quad y(2.0) \approx y_4 = 7.245$$

5. 取 $h = 0.2$,用四阶经典龙格-库塔方法求解下列初值问题:

(1) $\begin{cases} y' = x + y, & 0 < x < 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$;　(2) $\begin{cases} y' = \dfrac{3y}{1+x}, & 0 < x < 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$.

解 利用四阶经典龙格-库塔方法. 对于问题(1),$f(x, y) = x + y$;对于问题(2),$f(x, y) = \dfrac{3y}{1+x}$. 取 $h = 0.2$,$y_0 = y(0) = 1$,分别计算两问题的近似解见下表:

x_n	(1) 的解 y_n	(2) 的解 y_n
0.2	1.242 800 000	1.727 548 209
0.4	1.583 635 920	2.742 951 299
0.6	2.044 212 913	4.094 181 355
0.8	2.651 041 652	5.829 210 728
1.0	3.436 502 273	7.996 012 143

6. 证明对任意参数 t,下列龙格-库塔方法是二阶的.

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{1}{2}h(K_2 + K_3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + th, y_n + thK_1) \\ K_3 = f(x_n + (1-t)h, y_n + (1-t)hK_1) \end{cases}$$

证明　根据截断误差定义，只要证明 $T_{n+1}=O(h^3)$ 即可，而

$$T_{n+1}=y(x+h)-y(x)-h\varphi(x,y,h)$$

$$\varphi(x,y,h)=\frac{1}{2}[f(x+th,y+thy'(x))+f(x+(1-t)h,y+(1-t)hy'(x))]$$

因此只须将 $y(x+h)$ 和 $\varphi(x,y,h)$ 都在 x 处展开即可得到余项表达式：

$$f(x+th,y+thy'(x))=f(x,y)+th\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)+thy'(x)\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)+O(h^2)$$

$$f(x+(1-t)h,y+(1-t)hy'(x))=$$

$$f(x,y)+(1-t)h\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)+(1-t)hy'(x)\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)+O(h^2)$$

所以

$$T_{n+1}=y(x)+hy'(x)+\frac{1}{2}h^2y''(x)+\frac{1}{3!}h^3y'''(\xi)-y(x)-$$

$$\frac{1}{2}h\left[2f(x,y)+h\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)+hy'(x)\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)+O(h^2)\right]=O(h^3)$$

故对任意参数 t，此方法是二阶的．

7．证明中点公式

$$\begin{cases}y_{n+1}=y_n+hK_2\\K_1=f(x_n,y_n)\\K_2=f\left(x_n+\frac{h}{2},y_n+\frac{h}{2}K_1\right)\end{cases}$$

是二阶的，并求其绝对稳定区间．

解　根据截断误差定义

$$T_{n+1}=y(x_{n+1})-y(x_n)-hf\left(x_n+\frac{h}{2},y(x_n)+\frac{h}{2}y'(x_n)\right)=$$

$$y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2}y''(x_n)+\frac{1}{3!}h^3y'''(x_n)+O(h^4)-$$

$$y(x_n)-h\left\{f(x_n,y(x_n))+\frac{h}{2}\frac{\partial f(x_n,y(x_n))}{\partial x}+\right.$$

$$\frac{h}{2}y'(x_n)\frac{\partial f(x_n,y(x_n))}{\partial y}+$$

$$\frac{1}{2!}\left[\left(\frac{h}{2}\right)^2\frac{\partial^2 f(x_n,y(x_n))}{\partial x^2}+\right.$$

$$\frac{h}{2}\frac{h}{2}y'(x_n)\frac{\partial^2 f(x_n,y(x_n))}{\partial x\partial y}+$$

$$\left(\frac{h}{2}y'(x_n)\right)^2\frac{\partial^2 f(x_n,y(x_n))}{\partial y^2}\Bigg]+O(h^3)\Bigg\}=$$

$$\frac{h^3}{3!}y'''(x_n)-\frac{h^3}{8}\left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+y'(x)\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}+(y'(x))^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\right]_{(x_n,y(x_n))}+$$

$$O(h^4)=O(h^3)$$

因此，中点公式是二阶的.

若 $y'=\lambda y(\mathrm{Re}(\lambda)<0)$，则

$$y_{n+1}=\left[1+\lambda h+\frac{1}{2}(\lambda h)^2\right]y_n$$

即当 $\left|1+\lambda h+\frac{1}{2}(\lambda h)^2\right|\leqslant 1$，$-2\leqslant\lambda h\leqslant 0$ 时，中点公式绝对稳定.

8. 对于初值问题

$$y'=-100(y-x^2)+2x,\quad y(0)=1$$

(1) 用欧拉法求解，步长 h 取什么范围的值，才能使计算稳定？

(2) 若用四阶龙格-库塔方法计算，步长 h 如何选取？

(3) 若用梯形公式计算，步长 h 有无限制？

解 (1) 欧拉法的绝对稳定区间为

$$|1+(-100h)|\leqslant 1$$

即

$$0<h\leqslant 0.02$$

(2) 四阶龙格-库塔法的绝对稳定区间为

$$\left|1+\lambda h+\frac{1}{2}(\lambda h)^2+\frac{1}{3!}(\lambda h)^3+\frac{1}{4!}(\lambda h)^4\right|\leqslant 1$$

即 $-2.785\leqslant\lambda h<0$，$0<h\leqslant\frac{-2.785}{\lambda}=0.02785$.

(3) 梯形法的绝对稳定区间为 $\lambda h=-100h\in(-\infty,0)$，即

$$0<h<\infty$$

故对步长无限制.

9. 分别用二阶显式阿当姆斯方法和二阶隐式阿当姆斯方法解下列初值问题：

$$y'=1-y,\quad y(0)=0$$

取 $h=0.2$，$y_0=0$，$y_1=0.181$，计算 $y(1.0)$ 并与准确解 $y=1-e^{-x}$ 相比较.

解 二阶阿当姆斯显式和隐式方法分别为

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{2}(3f_{n+1} - f_n)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$$

将 $f = 1 - y$ 代入上二式，化简得

显式方法　$$y_{n+2} = \left(1 - \frac{3}{2}h\right)y_{n+1} + \frac{h}{2}y_n + h$$

隐式方法　$$y_{n+1} = \frac{2-h}{2+h}y_n + \frac{2h}{2+h}$$

取 $h = 0.2$，$y_0 = 0$，$y_1 = 0.181$，计算结果见下表：

x_n	显式 y_n	$\lvert y(x_n) - y_n \rvert$	隐式 y_n	$\lvert y(x_n) - y_n \rvert$
0.4	0.326 7	$0.297\,995\,3 \times 10^{-2}$	0.329 909 09	$0.229\,136 \times 10^{-3}$
0.6	0.446 79	$0.439\,836\,3 \times 10^{-2}$	0.451 743 801	$0.555\,437 \times 10^{-3}$
0.8	0.545 423	$0.524\,803\,5 \times 10^{-2}$	0.551 426 746	$0.755\,710 \times 10^{-3}$
1.0	0.626 475 1	$0.564\,545\,8 \times 10^{-2}$	0.632 985 52	$0.864\,961 \times 10^{-3}$

可见，隐式方法比显式方法精确．

10. 证明解 $y' = f(x, y)$ 的下列差分公式

$$y_{n+1} = \frac{1}{2}(y_n + y_{n-1}) + \frac{h}{4}(4y'_{n+1} - y'_n + 3y'_{n-1})$$

是二阶的，并求出局部截断误差的主项．

证明　由局部截断误差的定义知

$$T_{n+1} = y(x_n + h) - \frac{1}{2}(y(x_n)) + y(x_n - h)) -$$

$$\frac{1}{4}h[4y'(x_n + h) - y'(x_n) + 3y'(x_n - h)] =$$

$$y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{1}{2}h^2 y''(x_n) +$$

$$\frac{1}{3!}h^3 y'''(x_n) + O(h^4) - \frac{1}{2}y(x_n) -$$

$$\frac{1}{2}\left[y(x_n) - y'(x_n) + \frac{1}{2}h^2 y''(x_n) - \frac{1}{3!}h^3 y'''(x_n) + O(h^4)\right] -$$

$$\frac{h}{4}\Big[4\Big(y'(x_n)+hy''(x_n)+\frac{1}{2}h^2y'''(x_n)+O(h^3)\Big)-y'(x_n)+$$

$$3\Big(y'(x_n)-hy''(x_n)+\frac{1}{2}h^2y'''(x_n)+O(h^3)\Big)\Big]=$$

$$\Big(1-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\Big)y(x_n)+\Big(\frac{1}{2}-\frac{1}{4}-1+\frac{3}{4}\Big)h^2y''(x_n)+$$

$$\Big(\frac{1}{6}+\frac{1}{12}-\frac{1}{2}-\frac{3}{8}\Big)h^3y'''(x_n)+O(h^4)=$$

$$-\frac{5}{8}h^3y'''(x_n)+O(h^4)$$

故方法是二阶的，局部截断误差的主项为 $-\frac{5}{8}h^3y'''(x_n)$.

11. 试证明线性二步法

$$y_{n+2}+(b-1)y_{n+1}-by_n=\frac{h}{4}[(b+3)f_{n+2}+(3b+1)f_n]$$

当 $b\neq-1$ 时，方法为二阶，当 $b=-1$ 时，方法为三阶.

解 由局部截断误差定义知

$$T_{n+2}=y(x_n+2h)+(b-1)y(x_n+h)-by(x_n)-$$

$$\frac{h}{4}[(b+3)y'(x_n+2h)+(3b+1)y'(x_n)]=$$

$$y(x_n)+2hy'(x_n)+\frac{1}{2}(2h)^2y''(x_n)+\frac{1}{3!}(2h)^3y'''(x_n)+$$

$$\frac{1}{4!}(2h)^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)+(b-1)\Big[y(x_n)+hy'(x_n)+$$

$$\frac{1}{2}h^2y''(x_n)+\frac{1}{3!}h^3y'''(x_n)+\frac{1}{4!}h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)\Big]-$$

$$by(x_n)-\frac{h}{4}(b+3)\Big[y'(x_n)+2hy''(x_n)+\frac{1}{2!}(2h)^2y'''(x_n)+$$

$$\frac{1}{3!}(2h)^3y^{(4)}(x_n)+O(h^4)\Big]-\frac{h}{4}(3b+1)y'(x_n)=$$

$$(1+b-1-b)y(x_n)+$$

$$\Big[2+b-1-\frac{1}{4}(b+3)-\frac{1}{4}(3b+1)\Big]hy'(x_n)+$$

$$\Big[2+\frac{1}{2}(b-1)-\frac{1}{2}(b+3)\Big]h^2y''(x_n)+$$

$$\Big[\frac{4}{3}+\frac{1}{6}(b-1)-\frac{1}{2}(b+3)\Big]h^3y'''(x_n)+$$

$$\left[\frac{2}{3}+\frac{1}{24}(b-1)-\frac{1}{3}(b+3)\right]h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)=$$

$$-\frac{1}{3}(b+1)h^3y'''(x_n)-\left(\frac{3}{8}-\frac{7}{24}b\right)h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)$$

当 $b\neq-1$ 时，

$$T_{n+2}=-\frac{1}{3}(b+1)h^3y'''(x_n)+O(h^4)$$

该方法为二阶；当 $b=-1$ 时，

$$T_{n+2}=-\left(\frac{3}{8}-\frac{7}{24}b\right)h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)$$

该方法为三阶．

12. 求方程组

$$\begin{cases}u'=-10u+9v\\v'=10u-11v\end{cases}$$

的刚性比，用四阶 R-K 方法求解时，最大步长能取多少？

解　根据刚性比的定义，若方程组的矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-10 & 9\\10 & -11\end{bmatrix}$ 的特征值 λ_j 满足条件 $\mathrm{Re}(\lambda_j)<0(j=1,2)$，则刚性比为

$$S=\frac{\max\limits_{1\leqslant j\leqslant 2}|\mathrm{Re}(\lambda_j)|}{\min\limits_{1\leqslant j\leqslant 2}|\mathrm{Re}(\lambda_j)|}$$

$\boldsymbol{A}$ 的两个特征值为

$$\lambda_1=-1,\quad \lambda_2=-20$$

所以

$$S=20$$

利用四阶 R-K 方法求解时，绝对稳定区间在 $\lambda h\in[-2.78,0)$，故 $0<h\leqslant\frac{-2.78}{-20}=0.139$．

附　录

自测试题(一)

1. 填空题(20 分)

(1) 设 $x^* = 2.40315$ 是真值 $x = 2.40194$ 的近似值，则 x^* 有________位有效数字.

(2) 设 $f(x) = x^3 + x - 1$，则差商(均差) $f[0,1,2,3] =$ ________，$f[0,1,2,3,4] =$ ________.

(3) $\sqrt{x^*}$ 的相对误差约是 x^* 的相对误差的________倍.

(4) 拟合三点 $(x_0, f(x_0))$，$(x_1, f(x_1))$，$(x_2, f(x_2))$ 的水平直线是________.

(5) 用单节点的高斯-勒让德求积公式计算积分 $\int_0^2 \frac{(x-1)^2}{x^2+1}dx$ 的值为________.

2. (10 分) 用二次拉格朗日插值多项式 $L_2(x)$ 计算 sin0.34 的值. 插值节点和相应的函数值是(0,0)，(0.30,0.2955)，(0.40,0.3894).

3. (10 分) 求函数 $f(x) = e^x$ 在区间[0,1]上的二次最佳平方逼近多项式及相应的平方逼近误差 $\|\delta\|_2$(小数点后至少保留五位).

4. (10 分) 用二分法求方程 $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$ 在[1.0,1.5]区间内的一个根，误差限 $\varepsilon = 10^{-2}$.

5. (12 分) 选取常数 a, b，使得 $\max\limits_{0\leqslant x\leqslant 1} |e^x - ax - b|$ 达到最小.

6. (12 分) 用矩阵三角分解法解方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 5 & 9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 3 \\ 7 \end{bmatrix}$$

7.(12 分)给定一阶方程组初值问题

$$\begin{cases} y' = 2z + 3x \\ z' = 2y - z \\ y(0) = z(0) = 1 \end{cases}$$

(1)写出用欧拉预估-校正法求解此初值问题的计算公式;

(2)取步长 $h = 0.1$,计算 $y(0.1)$ 和 $z(0.1)$ 的近似值.

8.(14 分)证明区间$[a,b]$上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式 $P_n(x)(n = 1,2,3,\cdots)$ 的 n 个根都是单根,且位于区间(a,b)内.

自测试题(一)参考答案

1.填空题

(1)3　(2)1,0　(3) $\frac{1}{2}$　(4) $y = \frac{1}{3}\sum_{i=0}^{2} f(x_i)$　(5)0

2. 0.333 36

3. $1.012\,99 - 0.851\,12x + 0.839\,18x^2$;$\|\delta\|_2 = 0.008\,589\,1$

4. $N = 6, x_1 = 1.25, x_2 = 1.375, x_3 = 1.312\,5, x_4 = 1.343\,75,$
$x_5 = 1.328\,125, x_6 = 1.320\,312\,5$

5. $a = e - 1, b = \frac{e - (e-1)\ln(e-1)}{2}$

6. $x_1 = x_2 = 0, x_3 = x_4 = 1$

7.(1)略;(2)$y(0.1) \approx 1.245, z(0.1) \approx 1.335$

8.略

自测试题(二)

1.填空题(20 分)

(1)设 $x_A = 0.231$ 是真值 $x_T = 0.229$ 的近似值,则 x_A 有________位有效数字.

(2)求积公式$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{3}{4}f\left(\frac{1}{3}\right)\frac{1}{4}f(1)$的代数精确度为________.

(3)设方程 $f(x) = x^3 + x - 1$,则差商(均差)$f[0,1,2,3] =$ ________,$f[0,1,2,3,4] =$ ________.

(4) 设 $A=\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{bmatrix}$,则 $\rho(A)=$ ________.

(5) 若 $S(x)=\begin{cases}x^3 & 0\leqslant x\leqslant 1\\ \frac{1}{2}(x-1)^3+a(x-1)^2+b(x-1)+c, & 1\leqslant x\leqslant 3\end{cases}$

是三次样条函数,则 $a=$ ________,$b=$ ________,$c=$ ________.

2.(12 分) 已知单调连续函数 $y=f(x)$ 的如下数据:

x_i	-0.11	0.00	1.50	1.80
$f(x_i)$	-1.23	-0.10	1.17	1.58

若用插值法计算,x 约为多少时 $f(x)=1$(小数点后保留 5 位).

3.(12 分) 用矩阵三角分解法解线性方程组:

$$\begin{bmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 1 & 3 & 4 & 5\\ 2 & 1 & 4 & 4\\ 2 & 3 & 2 & 5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\\ x_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\ 3\\ 3\\ 2\end{bmatrix}$$

4.(10 分) 选取常数 a,使得 $\int_0^1 |e^x-a|\,dx$ 达到极小,并求极小值.

5.(10 分) 建立 Gauss 型求积公式 $\int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}}dx\approx A_1f(x_1)+A_2f(x_2)$.

6.(12 分) 设 $a>0$、$x_0>0$. 证明

$$x_{k+1}=\frac{x_k(x_k^2+3a)}{3x_k^2+a},\quad k=0,1,2,\cdots$$

是求 $\sqrt{a}$ 的三阶迭代方法

7.(10 分) 用复化辛浦生公式求积分 $\int_1^7 x^2\lg x\,dx$ 的近似值,要求取 7 个等距节点(包括端点 1 和 7),小数点后保留四位以上.

8.(14 分) 用插值法求在 $x=0$ 与 $\cos x$ 相切、在 $x=\frac{\pi}{2}$ 与 $\cos x$ 相交的二次多项式 $P_2(x)$,并推导插值余项的估计式

$$|P_2(x)-\cos x|\leqslant\frac{1}{6}x^2(x-\frac{\pi}{2})$$

自测试题(二) 参考答案

1. 填空题

(1)2　(2)2　(3)1,0　(4)3　(5)$a = b = 3, c = 1$

2. $x \approx 1.321\ 479$

3. $x = [1,1,1,-1]^T$

4. $\alpha = \dfrac{1}{2}$,最小值为 0.420 838

5. $x_1 = 0.045\ 536\ 361, x_2 = 0.642\ 193\ 058$

$A_1 = 1.035\ 301\ 293, A_2 = 0.964\ 698\ 706$

6. 略

7. 80.116 2

8. $P_2(x) = -\dfrac{4}{\pi^2}x^2 + 1$

自测试题(三)

1. 填空题(20 分)

(1) 要使得 $\sqrt{20}$ 的相对误差不超过 0.1%,应取________位有效数字.

(2) 设 $I(f) = \int_0^1 \sqrt{1+e^x}\,dx$,则用 2 点高斯公式所得近似值为________(结果保留 7 位有效数字).

(3) 求方程 $x = f(x)$ 根的牛顿迭代公式为________.

(4) 设 $A = \begin{bmatrix} 100 & 99 \\ 99 & 98 \end{bmatrix}$,计算 A 的条件数 $\text{Cond}(A)_2 =$ ________.

(5) 已知函数 $f(x) = \int_0^x e^{t^2}\,dt$,取 $h = 0.5$,利用欧拉法计算近似值 $f(0.5)$ = ________.

2. (10 分) 已知 $f(x)$ 的函数值 $f(0) = -5, f(1) = -3, f(-1) = -15, f(2) = -9$,求 Newton 均差插值多项式 $N_3(x)$ 及 $f(1.5)$ 的近似值.

3. (15 分) 求函数 $f(x) = \arctan x$ 在 $[0,1]$ 上的一次最佳平方逼近多项式(小数点后至少保留 5 位)。

4.(15 分)给定数据

x	1.30	1.32	1.34	1.36	1.38
$f(x)$	3.602 10	3.903 30	4.255 60	4.673 44	5.177 44

用复化 Simpson 公式计算 $I=\int_{1.30}^{1.38}f(x)\mathrm{d}x$ 的近似值,并估计误差.

5.(10 分)给定线性方程组 $\begin{bmatrix}a & c & 0\\ c & b & a\\ 0 & a & c\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}d_1\\ d_2\\ d_3\end{bmatrix}$,其中 a,b,c,d_1,d_2,d_3 均为已知常数,且 $abc\neq 0$.(1)写出 Gauss-Seidel 迭代格式;(2)分析该迭代格式的收敛性.

6.(10 分)求三阶矩阵 $\begin{bmatrix}2 & 2 & 1\\ 0 & 2 & 2\\ 2 & 1 & 2\end{bmatrix}$ 的 QR 分解,其中 Q 是正交矩阵,R 是上三角矩阵.

7.(10 分)证明方程 $f(x)=x^3-2x-5=0$ 在区间(2,3)内有唯一根 p. 用区间分半法计算 p 的近似值 x_n 时,试确定迭代次数使 $|x_n-p|<\frac{1}{2}\times 10^{-3}$(不要求计算 x_n).

8.(10 分)对常微分方程初值问题 $\begin{cases}y'=f(x,y)\\ y(a)=\eta\end{cases}$,$a\leqslant x\leqslant b$,使用预测校正公式 $\begin{cases}\bar{y}_{i+1}=y_i+hf(x_i,y_i)\\ y_{i+1}=y_i+\frac{h}{12}[5f(x_{i+1},\bar{y}_{i+1})+8f(x_i,y_i)-f(x_{i-1},y_{i-1})]\end{cases}$,求其局部截断误差,并指出该公式是一个几阶的公式.

自测试题(三)参考答案

1. 填空题

(1)4 (2)1.642 042 (3)$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n-f(x_n)}{1-f'(x_n)}$ (4)39 206 (5)0.5

2. $-4x^2+6x-5$、-5

3. $y=0.042\ 909+0.791\ 831x$

4. 0.343 984 6, -0.27×10^{-5}

5. 略

6. $\boldsymbol{Q}=\dfrac{1}{3\sqrt{2}}\begin{bmatrix}3 & 1 & -2\sqrt{2}\\ 0 & 4 & \sqrt{2}\\ 3 & -1 & 2\sqrt{2}\end{bmatrix}$, $\boldsymbol{R}=\dfrac{\sqrt{2}}{6}\begin{bmatrix}12 & 9 & 9\\ 0 & 9 & 7\\ 0 & 0 & 4\sqrt{2}\end{bmatrix}$

7. 11

8. $\dfrac{5}{24}h^3\dfrac{\partial f(x_{i+1},\eta_i)}{\partial y}y''(x_i)+O(h^4)$, 2 阶

参考文献

[1] 李庆扬. 数值分析复习考试指导. 北京:高等教育出版社,2000.

[2] 封建湖,车刚明,聂玉峰. 数据分析原理. 北京:科学出版社,2001.

[3] 封建湖,车刚明. 计算方法典型题分析解集. 西安:西北工业大学出版社,1998.

[4] 封建湖,聂玉峰,王振海. 数值分析导教·导学·导考. 西安:西北工业大学出版社,2003.

[5] 杨蕤. 数值分析全程导学及习题全解. 北京:中国时代经济出版社,2007.